

УДК 519.6

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ

Равшанов Н.¹, ⁺Набиева И.¹, Журабаева О.¹

¹НИИ развития цифровых технологий и искусственного интеллекта,
Ташкент, Узбекистан

⁺irodamubina777@gmail.com

Аннотация. В данной статье совершенствуется математическая модель процесса распространения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе с учетом их физико-механических свойств - диаметра частиц, коэффициента диффузии, температуры и коэффициента поглощения. В исследовании анализируется влияние различных метеорологических условий, скорости ветра, турбулентной диффузии и устойчивости атмосферы на пространственное и временное распределение загрязняющих веществ. Математические модели, численный алгоритм служат для мониторинга и прогнозирования концентрации и загрязняющих веществ в атмосфере, обеспечения экологической безопасности рассматриваем региона.

Ключевые слова: вредные вещества, направление ветра, коэффициент поглощения, коэффициент диффузии, атмосфера.

1 ВВЕДЕНИЕ

Распространение вредных веществ в атмосфере является экологической проблемой, и для проведения исследований составляется ее математическая модель, изучается и прогнозируется на основе аналитических результатов. Математическая модель включает описание переноса, турбулентной диффузии, физических процессов, влияющих на концентрацию загрязняющих веществ.

Ученые Л.К. Петерс, Ж.Т. Лин, Г.Ж. Макрай предложили математическую модель распространения вредных веществ в атмосфере на основе уравнения адвекции-диффузии и модели химического транспорта. Авторы изучили распространение химических загрязнителей, где рассмотрена интеграция влияния распространения химических процессов. Скорость ветра рассчитывалась по турбулентной диффузии, полученной из метеорологических данных, температура вводилась как фактор, влияющий на скорость химических реакций. Градиенты давления управляют движением ветра, рельеф упрощен, плотность изменяется в зависимости от температуры и давления [1-3].

Увеличение в атмосфере различных газов и аэрозольных частиц - углекислого газа, оксида углерода, диоксида серы, диоксида азота, озона, метана, оксида азота, летучих органических соединений, а также частиц PM_{2.5}, PM₁₀ - негативно влияет на здоровье человека. На рисунках 1, 2 и 3 показано состояние изменения углекислого газа и метана по годам.

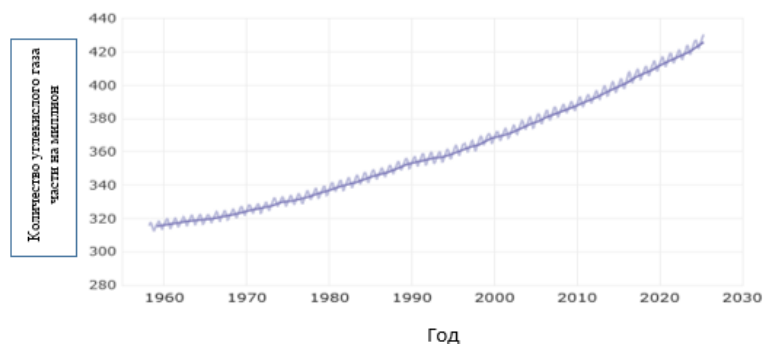


Рис. 1. Количество углекислого газа в атмосфере

Согласно рисунку 1, основанному на ежегодном анализе Глобальной лаборатории мониторинга NOAA, глобальный средний уровень углекислого газа в атмосфере в 2024 году составил 422,8 частей на миллион, что является новым историческим максимумом. Рост в 2024 году составил 3,75 частей на миллион, что является самым большим годовым ростом за всю историю наблюдений [4]. Из рисунка 2 видно, что за последнее десятилетие годовой прирост ускорился до 2,6 частей на миллион в год [4].

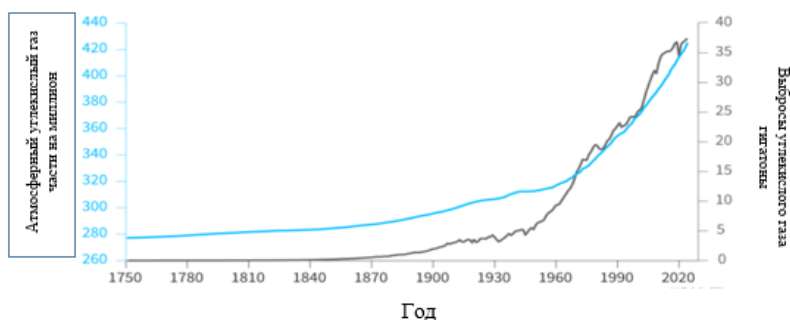


Рис. 2. Глобальные выбросы углекислого газа и содержание углекислого газа в атмосфере (1751-2024)



Рис. 3. Концентрация метана в атмосфере по всему миру

По рис. 3 можно увидеть ежемесячные глобальные усредненные по столбу атмосферные концентрации CO_2 и CH_4 по спутниковым данным за 2003–2023 гг. (пунктирная линия) и 12-месячное среднее значение (сплошная линия) [5].

Существует множество примеров различных вредных веществ, вызывающих повышенный уровень загрязнения воздуха, таких как углекислый газ и метан. Такие ситуации представляют серьезную угрозу для окружающей среды, что является причиной проведения научных исследований.

Авторы статей [6, 7] предложили математическую модель распространения вредных веществ в атмосфере на основе гауссовой модели. В статье изучается распространение промышленных отходов. В данной работе основное внимание уделено прогнозированию достаточного распространения от промышленных источников. Скорость ветра предполагалась постоянной, турбулентность рассчитывалась через параметры распространения, температура вводилась в зависимости от устойчивости атмосферы. Градиенты давления управляют движением ветра, рельеф моделируется в соответствии с условиями, освещение используется как среднее значение.

К.Р. Милне, Д.Ж. Томсон и Г.А. Грел в [8-10] предложили математическую модель распространения вредных веществ в атмосфере на основе модели Лагранжа. В [9] изучалась миграция загрязняющих частиц на большие расстояния. Эта модель направлена на прогнозирование перемещения частиц при распространении на большие расстояния. Скорость ветра берется из глобальных данных, турбулентная статистика обычно вводится как фактор, влияющий на стабильность температуры атмосферы. Градиенты давления контролируют перемещение ветра, рельеф упрощается, плотность изменяется в зависимости от метеорологических условий. Исследование включало анализ перемещения на большие расстояния. С.Л. Хес, А.М. Обухов, П.Ж. Масон в своих работах математически смоделировали распространение вредных атмосферных воздушных масс на основе уравнения адвекции-диффузии. В статье изучается распространение загрязняющих веществ в пограничном слое. Данный подход направлен на определение влияния турбулентности на распространение в пограничном слое. Скорость ветра получена на основе логарифмического профиля, турбулентность введена как фактор, контролирующей вертикальное распространение, температура использована через условия устойчивости. Градиенты давления обеспечивают движение ветра, рельеф использовался

для гладких поверхностей, плотность использовалась как среднее значение. В исследовании анализировались дисперсия, турбулентное движение в пограничном слое [11-13].

2 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим усовершенствованную математическую модель, которая учитывает важные параметры для изучения процесса переноса и диффузии вредных газов и аэрозольных частиц в атмосфере, такие как скорость и направление ветра, коэффициент поглощения, коэффициент диффузии. Математическая модель выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \theta(x, y, z, t)}{\partial t} + \frac{\partial u(x, y, z, t)\theta(x, y, z, t)}{\partial x} + \frac{\partial v(x, y, z, t)\theta(x, y, z, t)}{\partial y} + \\ & + \frac{\partial (w(x, y, z, t) - w_g)\theta(x, y, z, t)}{\partial z} + \sigma\theta(x, y, z, t) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x(x, y, z, t, T, |u|, d_p) \frac{\partial \theta(x, y, z, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y(x, y, z, t, T, |v|, d_p) \frac{\partial \theta(x, y, z, t)}{\partial y} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z(x, y, z, t, T, |w - w_g|, d_p) \frac{\partial \theta(x, y, z, t)}{\partial z} \right) + \delta Q(x, y, z, t) - R_{veg}(x, y, z, t), \end{aligned} \quad (1)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{aligned} & \theta|_{t=0} = \theta^0, \\ & \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\theta_{Ex0}(t) - \theta|_{x=0}}{l_x}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{x=L_x} = \frac{\theta_{ExL}(t) - \theta|_{x=L_x}}{l_x}, \\ & \frac{\partial \theta}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\theta_{Ey0}(t) - \theta|_{y=0}}{l_y}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} \Big|_{y=L_y} = \frac{\theta_{EyL}(t) - \theta|_{y=L_y}}{l_y}, \\ & \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} = \frac{\theta_{Ez0}(t) - \theta|_{z=0}}{l_z}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=L_z} = \frac{\theta_{EzL}(t) - \theta|_{z=L_z}}{l_z}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь, θ – концентрация вредных веществ в атмосфере, t – время, T – температура, $\theta_{Ex0}(t), \theta_{Ey0}(t), \theta_{Ez0}(t)$ – концентрация за пределами области, $\theta_{ExL}(t), \theta_{EyL}(t), \theta_{EzL}(t)$ – концентрация, поступающая с границы области концентрации, x, y, z – координаты системы, u, v, w – скорости ветра по трем направлениям получает из базы данных OWM, w_g – скорость оседания частиц, σ – коэффициент поглощения вредных веществ в атмосфере, D_x, D_y, D_z – коэффициенты диффузии, Q – мощность источника, δ – функция Дирака, R_{veg} – поглощение растением, d_p – диаметр частицы, l_x, l_y, l_z – расстояние между точками.

Вредные вещества, находящиеся в атмосфере, взаимодействуют с биологическими объектами, особенно с растениями. Эти загрязняющие вещества поглощаются растениями в земной коре посредством физических, химических или биологических процессов. Этот процесс поглощения не статичен, а динамичен и зависит от многих факторов, таких как время, концентрация, температура, влажность и биологическая активность растения. Поэтому процесс поглощения растениями вредных веществ описывается следующим образом:

$$R_{veg} = k_{veg} \cdot V \cdot \theta,$$

где k_{veg} – коэффициент плотности растительности, V – скорость поглощения растениями.

Также коэффициент диффузии является одним из важнейших физико-параметров при распространении вредных веществ. Она характеризует скорость и направление, с которыми загрязняющие частицы распространяются в окружающей среде. Функция расчета коэффициентов диффузии была определена в работах [14-16]. При этом для приближения коэффициентов диффузии к реальным процессам предлагается учитывать скорость ветра, размеры частиц и температуру, а также рассчитывать коэффициенты диффузии по направлениям x, y и z . Основной подход заключается в следующем:

- скорость ветра - играет ключевую роль в процессе распространения вредных веществ. Чем выше скорость ветра, тем быстрее и дальше распространяются частицы. Поэтому коэффициент диффузии изменяется пропорционально скорости ветра;

- размеры частиц - крупные частицы тяжелее, они быстрее оседают и скапливаются в нижних слоях атмосферы, тогда как мелкие частицы могут распространяться на большие расстояния. Следовательно, коэффициент диффузии напрямую зависит от диаметра частиц;

- температура - при высокой температуре молекулы газа становятся более подвижными, что увеличивает их скорость и, соответственно, повышает коэффициент диффузии. При низкой температуре, наоборот, процесс диффузии замедляется.

Многомерная диффузия - в реальной атмосфере процессы диффузии происходят не только в одном измерении, но и в направлениях по x , y и z . Поэтому в данных работах коэффициент диффузии необходимо определять отдельно для каждого направления, учитывая процесс диффузии в зависимости от направления.

3 МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для нахождения численного решения этой математической задачи был использован метод конечных разностей. Расчеты выполнялись на основе явной схемы. Это означает, что решения на каждом этапе времени определяются только на основе значений на предыдущем этапе.

Сначала заменим переменные сеткой, состоящей из множества дискретных точек:

$$\Omega_{x,y,z,t} = \left\{ \left(x_i = i\Delta x, y_j = j\Delta y, z_k = k\Delta z, t_n = n\Delta t \right), \right. \\ \left. \begin{array}{l} i = \overline{1, I}; j = \overline{1, J}; k = \overline{1, K}; n = \overline{0, N_t}; \\ \Delta t = \frac{t}{N}, \Delta x = \frac{L_x}{I}, \Delta y = \frac{L_y}{J}, \Delta z = \frac{L_z}{K} \end{array} \right\},$$

где, I, J, K - число точек сетки по каждой из осей координат, N_t - число временных слоев, $\Delta x, \Delta y, \Delta z, \Delta t$ - значения шагов дискретизации по пространственным координатам и времени.

При этом для численного моделирования используется условие Куранта-Фридриха-Леви (CFL), при котором общий критерий устойчивости применяется к временным поэтапным схемам. Следует отметить, что определение оптимальных значений необходимо для обеспечения стабильности вычислительного процесса. При этом для численного моделирования динамических задач с жидкостью используется условие CFL, для которого общий критерий устойчивости применяется к временным ступенчатым схемам. Критерий CFL можно сформулировать следующим образом:

$$\Delta t \leq \frac{CFL}{\frac{|u|}{\Delta x} + \frac{|v|}{\Delta y} + \frac{|w|}{\Delta z}},$$

где: число CFL имеет значение меньше 1. При численном моделировании диффузионных процессов или вязких газовых потоков для обеспечения устойчивости вычислений применяются специальные критерии устойчивости, основанные на дискретизации диффузионного члена. В частности, в уравнениях Навье-Стокса, для явно заданных схем, учитывающих изотропную диффузию или коэффициенты кинематической вязкости, условие устойчивости выводится из дискретной формы соответствующих дифференциальных операторов по времени и пространству:

$$\theta_{i,j,k}^{n+1} = \theta_{i,j,k}^n - \Delta t \left[\frac{1}{2} \left(u_{i+1/2,j,k}^n \left(\frac{\theta_{i+1,j,k}^n - \theta_{i,j,k}^n}{\Delta x} \right) + u_{i-1/2,j,k}^n \left(\frac{\theta_{i,j,k}^n - \theta_{i-1,j,k}^n}{\Delta x} \right) \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left(v_{i,j+1/2,k}^n \left(\frac{\theta_{i,j+1,k}^n - \theta_{i,j,k}^n}{\Delta y} \right) + v_{i,j-1/2,k}^n \left(\frac{\theta_{i,j,k}^n - \theta_{i,j-1,k}^n}{\Delta y} \right) \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left((w_{i,j,k+1/2}^n - w_g) \left(\frac{\theta_{i,j,k+1}^n - \theta_{i,j,k}^n}{\Delta z} \right) + (w_{i,j,k-1/2}^n - w_g) \left(\frac{\theta_{i,j,k}^n - \theta_{i,j,k-1}^n}{\Delta z} \right) \right) \right] +$$

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{2} \left(D_{x\ i+1/2,j,k}^n \left(\frac{\theta_{i,j,k}^n - 2\theta_{i+1,j,k}^n + \theta_{i+2,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) + D_{x\ i-1/2,j,k}^n \left(\frac{\theta_{i-2,j,k}^n - 2\theta_{i-1,j,k}^n + \theta_{i,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) \right) + \right. \\
 & + \Delta t \left(\frac{1}{2} \left(D_{y\ i,j+1/2,k}^n \left(\frac{\theta_{i,j,k}^n - 2\theta_{i,j+1,k}^n + \theta_{i,j+2,k}^n}{\Delta y^2} \right) + D_{y\ i,j-1/2,k}^n \left(\frac{\theta_{i,j-2,k}^n - 2\theta_{i,j-1,k}^n + \theta_{i,j,k}^n}{\Delta y^2} \right) \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{2} \left(D_{z\ i,j,k+1/2}^n \left(\frac{\theta_{i,j,k}^n - 2\theta_{i,j,k+1}^n + \theta_{i,j,k+2}^n}{\Delta z^2} \right) + D_{z\ i,j,k-1/2}^n \left(\frac{\theta_{i,j,k-2}^n - 2\theta_{i,j,k-1}^n + \theta_{i,j,k}^n}{\Delta z^2} \right) \right) \right) \right) \\
 & + \Delta t \left(+\sigma\theta_{i,j,k}^n + Q_{i,j,k}^n - R_{veg\ i,j,k}^n \theta_{i,j,k}^n \right). \\
 & \Delta t \leq \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x^2 \Delta y^2 + \Delta x^2 \Delta z^2 + \Delta y^2 \Delta z^2}{D(\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2)} \right).
 \end{aligned}$$

Такой подход характеризуется вычислительной простотой и высокой скоростью реализации, что делает его удобным для моделирования динамических процессов.

4 ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рисунках 4-5 приведены результаты расчета процесса распространения вредных веществ в атмосфере.

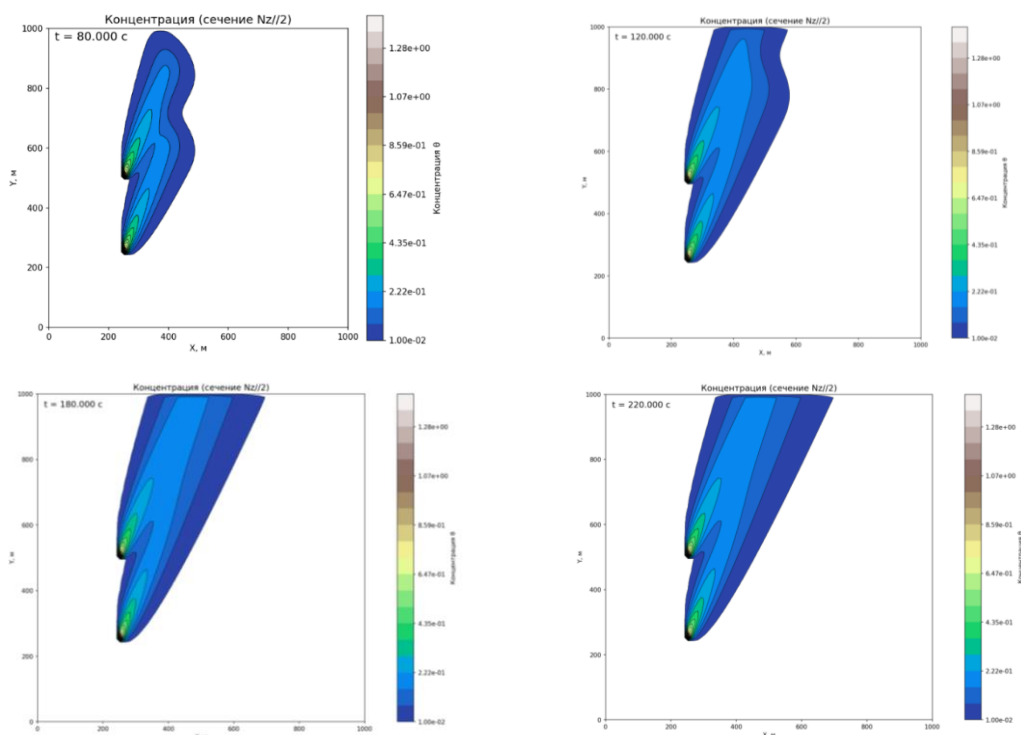


Рис. 4. Изменение концентрации вредных частиц во времени: в направлении ветра 75°

С течением времени динамика распространения загрязняющих веществ будет расширяться. Особенно важную роль в процессе распространения играет направление ветра - турбулентность воздуха и вертикальные потоки приводят к более быстрому и широкому распространению частиц. В результате форма и концентрация зоны загрязнения значительно изменяются со временем. При моделировании распространения промышленных выбросов в атмосферу необходимо учитывать метеорологические факторы. На рисунке 4 показано, как вредные вещества, выбрасываемые в атмосферу в разное время при 80 сек, 120 сек, 180 сек, 220 сек, распространяются по направлению ветра, дующего при 75° севернее. На рисунке 5 показано, на какое расстояние сместилась концентрация

при изменении направления ветра при 45 при тех же временах, что и выше, то есть в диапазоне 80 сек, 120 сек, 180 сек, 220 сек.

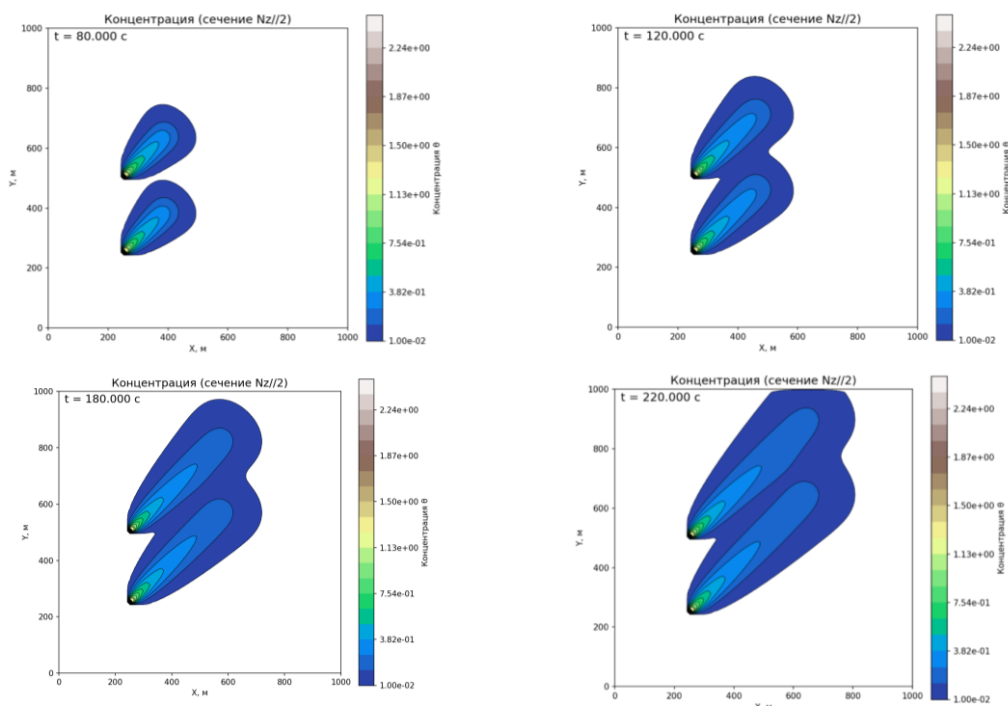


Рис. 5. Изменение концентрации вредных частиц во времени: в направлении ветра 45°

Учитывая это, на рисунках 5 показано, что при низких скоростях ветра коэффициент диффузии при распространении вредных веществ в атмосфере будет высоким, то есть при этом концентрация распределения, открытие шлейфа больше, место диффузии выше, чем адвекция.

5 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной статье усовершенствована математическая модель процесса распространения загрязняющих веществ в атмосфере с использованием адвекционно-диффузионной модели. В исследовании с целью реального моделирования распределения загрязняющих веществ в воздухе учитывались такие факторы, как их физико-механические свойства, диаметр частиц, коэффициент диффузии и поглощения, температура. Также глубоко проанализировано влияние метеорологических параметров, в частности, скорости ветра, турбулентной диффузии и устойчивости атмосферы на распределение вредных веществ, и математические уравнения были решены численными методами, основанными на подходе Эйлера.

При расчете распределения веществ с использованием уравнений адвекции-диффузии с использованием математической модели для прогнозирования распределения вредных веществ в атмосфере, с учетом основных воздействий был сделан следующий вывод. Учитывая, что скорость ветра, температура, тип вещества, распространяющегося в потоке, размер частиц и кинематическая вязкость связаны с температурой и размером частиц, изменение направления ветра приводит к изменению скорости ветра.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Peters, L. K. "Modeling chemical transport and dispersion in the atmosphere." *Atmospheric Environment*, 1995, Vol. 29, Issue 16, pp. 2035-2046. DOI: 10.1016/1352-2310(94)00341-9.
- [2] Lin, J. T. "Modeling chemical transport in the atmosphere." *Atmospheric Environment*, 2003, Vol. 37, Issue 28, pp. 3917-3927. DOI: 10.1016/S1352-2310(03)00485-8.
- [3] McRae, G. J. "Modeling chemical transport in the atmosphere." *Environmental Science & Technology*, 1982, Vol. 16, Issue 10, pp. 685-692. DOI: 10.1021/es00104a006.

- [4] <https://www.climate.gov/news-features/understanding-climate/climate-change-atmospheric-carbon-dioxide>
- [5] <https://climate.copernicus.eu/climate-indicators/greenhouse-gas-concentrations>
- [6] *Haugen, D. A.* "Gaussian modeling of industrial plume dispersion." *Journal of Air Pollution Control Association*, 1971, Vol. 21, Issue 6, pp. 351-357. DOI: 10.1080/00022470.1971.10469544.
- [7] *Benkley, C. W.* "Gaussian modeling of short-range industrial emissions." *Journal of Applied Meteorology*, 1977, Vol. 16, Issue 6, pp. 621-628. DOI: 10.1175/1520-0450(1977)016<0621:GMOSRI>2.0.CO;2.
- [8] *Mylne, K. R.* "Long-range transport modeling of atmospheric pollutants." *Atmospheric Environment*, 1992, Vol. 26, Issue 8, pp. 1425-1436. DOI: 10.1016/0960-1686(92)90128-8.
- [9] *Thomson, D. J.* "Lagrangian modeling of long-range atmospheric dispersion." *Atmospheric Environment*, 1987, Vol. 21, Issue 5, pp. 1053-1064. DOI: 10.1016/0004-6981(87)90230-8.
- [10] *Grell, G. A.* "Modeling chemical dispersion in the atmosphere." *Atmospheric Environment*, 1993, Vol. 27, Issue 16, pp. 2575-2587. DOI: 10.1016/0960-1686(93)90017-6.
- [11] *Hess, S. L.* "Turbulent dispersion in the atmospheric boundary layer." *Journal of Geophysical Research*, 1972, Vol. 77, Issue 18, pp. 3235-3244. DOI: 10.1029/JC077i018p03235.
- [12] *Obukhov, A. M.* "Modeling turbulent dispersion in the atmosphere." *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Geograficheskaya*, 1970, Vol. 34, Issue 5, pp. 503-514. DOI: 10.1016/0004-6981(71)90081-1 (translated version reference).
- [13] *Mason, P. J.* "Turbulent dispersion in the atmospheric boundary layer." *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 1989, Vol. 115, Issue 487, pp. 573-591. DOI: 10.1002/qj.49711548706.
- [14] *Равшанов Н., Набиева И.* Моделирование транспорта токсичных загрязняющих веществ в атмосфере // Сборник тезисов первой международной научно-технической конференции «Современные проблемы физики, энергетики и теплотехники» Декабрь 5, 2024. – С. 251-253.
- [15] *Равшанов Н., Набиева И.С.* Математическое моделирование процесса распространения вредных веществ в атмосфере с учетом температуры, физических и химических свойств // Международный журнал теоретических и прикладных вопросов цифровых технологий. – 2024. – № 7(4) – С. 27-32
- [16] *Nabieva I.S.* 2025. Numerical modeling of the transport and diffusion of pollutant particles taking into account airflow characteristics and temperature. *Problems of Computational and Applied Mathematics*. 1(63):27-40.

Поступила в редакцию 28.04.2025

Цитирование: *Равшанов Н., Набиева И., Журабаева О. (2025). Математическое моделирование пространственно-временного распределения загрязняющих веществ в атмосфере. Международный журнал теоретических и прикладных вопросов цифровых технологий, 8(3), –С. 63-69. <https://doi.org/10.62132/ijdt.v8i3.287>.*

MATHEMATICAL MODELING OF SPATIAL-TEMPORAL DISTRIBUTION OF POLLUTANTS IN THE ATMOSPHERE

Ravshanov N.¹, Nabieva I.¹, Juraboeva O.¹

¹ Digital Technologies and Artificial Intelligence Development Research Institute, Tashkent, Uzbekistan

Abstract. This article improves the mathematical model of the process of pollutant distribution in the atmospheric air taking into account their physical and mechanical properties - particle diameter, diffusion coefficient, temperature and absorption coefficient. The influence of various meteorological conditions, wind speed, turbulent diffusion and atmospheric stability on the spatio-temporal distribution of pollutants is analyzed. Mathematical models and numerical algorithms allow monitoring and forecasting the concentration of pollutants in the atmosphere, ensuring environmental safety of the region under consideration.

Keywords: harmful substances, wind direction, absorption coefficient, diffusion coefficient, atmosphere.