

Математическая модель распространения примеси в приземном слое атмосферы и ее программная реализация на многопроцессорной вычислительной системе*

А.И. Сухинов, Д.С. Хачунц, А.Е. Чистяков

Южный федеральный университет

Целью работы является разработка математической модели движения многокомпонентной воздушной среды, учитывающей транспорт загрязняющих веществ (ЗВ) и тепла, фазовые переходы, а также влияние растительного покрова (лесных насаждений) на распространение ЗВ в атмосфере; построение и исследование разностных схем, аппроксимирующих исходную задачу; программная реализация разработанных параллельных алгоритмов и проведение численных экспериментов по моделированию движения многокомпонентной воздушной среды, в том числе применительно к рекреационной среде прибрежных систем. Поскольку задачи прогнозирования распространения загрязняющих веществ должны решаться в реальном или ускоренном масштабах времени, на сетках включающих 10^6 - 10^9 узлов, необходима разработка параллельных алгоритмов задач гидродинамики на системах с массовым параллелизмом. Предложена новая математическая модель аэродинамических процессов, учитывающая повышенную влажность воздуха, изменчивость атмосферного давления и температуры и др., что особенно свойственно прибрежным районам. Разработаны параллельные алгоритмы исследования этих моделей, реализованные в виде комплекса программ.

1. Введение

Одним из практически важных разделов наук, связанных с изучением математического моделирования, является изучение процесса распространения примесей в приземном слое атмосферы. Математическое моделирование является надежным и эффективным методом анализа и оценки состояния воздушной среды, которое позволяет определить распределение концентрации примеси в атмосфере, учитывающее многокомпонентный характер среды.

В области математического моделирования движения загрязнений в атмосфере и разработки численных методов для него, в настоящее время, сложилась ситуация, при которой проводимые в мире работы рассматривают отдельные явления и не охватывают их комплекса. Работы, посвященные математическому моделированию приземной аэродинамики, впервые в Советском Союзе появились у академика А.С. Моница [1]. Далее в Ленинграде профессор М.Е. Берлянд перехватил научную эстафету. Более поздние исследования такого типа начались в Новосибирске академиком Г.И. Марчуком [2, 3]. Рассеяние примеси, которое учитывает турбулентность, и к ним примыкают дополнительные условия (распространение тепла, влажности и т.д.), которые потом начинают воздействовать как единая система. Конечно, эта система - сложная, поэтому требует привлечения численных методов. Для решения проблем, отвечающие поставленной задаче, необходима разработка новых математических моделей, которые базируются на уравнениях газовой динамики и законах сохранения вещества.

Однако сложность и взаимосвязанность процессов распространения, и рассеяния примеси, происходящих в турбулентном атмосферном пограничном слое, делают модели прогнозирования качества воздуха громоздкими в математической записи и весьма требовательными к вычислительным ресурсам. Перспективным способом решения этих проблем является применение эффективных численных схем высокого порядка точности и использование компьютеров с параллельной архитектурой при проведении вычислений. Параллельному программированию и методам распараллеливания численных алгоритмов посвящены работы В.В. Воеводина [4, 5],

* Работа выполнена при частичной поддержке проектов Программы № 43 фундаментальных исследований Президиума РАН по стратегическим направлениям развития науки "Фундаментальные проблемы математического моделирования "

Б.Н. Четверушкина [6], Ю.И. Шокина, В.П. Гергеля [4, 5], В. И. Малышкина, И.Б. Петрова [7], М.В. Якововского [8], В.А. Вшивкова, D. Dubdub и др.

2. Основные уравнения модели приземной аэродинамики

Атмосфера представляет собой сложную динамическую систему, в которой протекают различные динамические и физико-химические процессы. Эти процессы обусловлены как атмосферной циркуляцией, так и трансформацией газовых и аэрозольных примесей.

Движение воздушной среды и распространение в ней загрязняющих веществ проходит в четыре стадии [9]: модель движения многокомпонентной воздушной среды, которая предназначена для поля вектора скорости, учитывающая турбулентный обмен, переменную плотность, зависимость плотности воздушной среды от давления; модель, описывающая процессы переноса примеси, учитывающая переход воды из жидкого в газообразное состояние и наоборот, осаждение вещества, модель притока тепла, которая описывается уравнениями теплопроводности газа и конденсата, учитывающая теплообмен между жидкими и газообразными состояниями и транспорт тепла; модель расчета давления, учитывающая сжимаемость среды, тепловое расширение, источники вещества, связанные с переходом воды из жидкого состояния в газообразное и обратно, а так же турбулентное перемешивание многокомпонентной воздушной среды.

Исходными уравнениями модели движения многокомпонентной воздушной среды являются [3]:

- уравнение движения: $dv_j / dt = -(1/\rho)\partial p / \partial x_j + \text{div}(\mu \text{grad}(v_j)) - g_j$;
- уравнение транспорта вещества [10]: $\partial \rho / \partial t + \text{div}(\rho \vec{v}) = \text{div}(\mu \text{grad}(\rho)) + I_\rho$;
- уравнение состояния (аналог уравнение Менделеева-Клапейрона): $P = \sum_i \rho_i RT / M_i$;
- уравнение транспорта примеси: $d\varphi_i / dt = \text{div}(\mu \text{grad}(\varphi_i)) + I_\varphi$;
- уравнение притока тепла: $dQ / dt = \text{div}(\mu \text{grad}(Q)) + \text{div}(\lambda \text{grad}(T)) + I_Q$;
- уравнение модели турбулентности: $v_{SGS} = (C_s \Delta)^2 S$;

где φ_i – объемные доли i -ой фазы ($i=0$ – воздух, 1 – вода в газообразном состоянии, 2 – газ на источнике, 3 – вода в жидком состоянии, 4 – сажа), v_j – проекции компонентов скорости на оси Ox_j , $j=1,2,3$, g – ускорение свободного падения, p – давление, R – универсальная газовая постоянная, M – молярная масса, I – функция, описывающая распределение и мощность источников примесей, T – температура газовой фазы, Q – тепловая энергия, λ – коэффициент теплопроводности, μ – коэффициент турбулентного обмена, ρ – плотность воздушной среды. Здесь и далее символ « d/dt » означает полную производную по времени от функции, зависящей в общем случае от времени t и трех пространственных координат x, y, z .

Переход от трехмерных моделей к двумерным. С целью получения нетрудоемких для вычисления дискретных моделей осуществляется переход от трехмерных моделей к двумерным. Рассмотрим трехмерное уравнение диффузии–конвекции–реакции:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) + I_\rho.$$

Будем рассматривать уравнение при следующем граничном условии: $\rho \mu \rho'_n = -\tau$, где τ – параметр, описывающий наличие источника на боковых поверхностях, n – вектор нормали.

В результате преобразований получим:

$$\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon \rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\varepsilon \rho w)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) - \frac{\tau}{\rho} \Big|_{y_a}^{y_b} + \varepsilon I_\rho,$$

где ε – параметр, описывающий относительную величину объема, свободного от растений, $\mu = \mu(\varepsilon, n_i)$ – коэффициент турбулентного обмена, зависящий от проницаемости и видового

состава лесного насаждения, который задается параметром $n_l, l=1,2,\dots,L, L$ – общее количество видов, составляющих данное насаждение.

3. Двумерная дискретная модель распространения примеси в приземном слое атмосферы

3.1 Математическая модель аэродинамики приземного слоя атмосферы

Рассмотрим основные уравнения динамики воздушной среды:

– система уравнений Навье-Стокса

$$\begin{aligned} \varepsilon u'_t + u\varepsilon u'_x + v\varepsilon u'_z &= -\frac{1}{\rho}(\varepsilon P)'_x + (\mu\varepsilon u'_x)'_x + (\mu\varepsilon u'_z)'_z + \varepsilon f_x, \\ \varepsilon w'_t + u\varepsilon w'_x + w\varepsilon w'_z &= -\frac{1}{\rho}(\varepsilon P)'_z + (\mu\varepsilon v'_x)'_x + (\mu\varepsilon w'_z)'_z + \varepsilon f_z \end{aligned} \quad (1)$$

– уравнение неразрывности $\varepsilon\rho'_t + (\varepsilon\rho u)'_x + (\varepsilon\rho w)'_z = (\varepsilon\mu\rho'_x)'_x + (\varepsilon\mu\rho'_z)'_z + \varepsilon I_\rho$, (2)

– уравнение состояния $P = \sum_i \frac{\rho_i}{M_i} RT$ (3)

где ε – параметр, описывающий относительную величину объема, свободного от растений, $\mu = \mu(\varepsilon, n_l)$ – коэффициент турбулентного обмена, зависящий от проницаемости и видового состава лесного насаждения, который задается параметром $n_l, l=1,2,\dots,L, L$ – общее количество видов, составляющих данное насаждение.

Предположив, что воздушная среда, изначально, находится в состоянии покоя, начальные условия будут иметь вид: $u = 0, w = 0, P = P_a$, где $\vec{V} = \{u, w\}$ – значение компонент вектора скорости, P_a – атмосферное давление.

Система уравнений (1), (2) рассматриваются при следующих граничных условиях:

– на непроницаемой границе: $\rho_w \eta u'_n = \tau_{x,b}(t), \rho_w \eta v'_n = \tau_{z,b}(t), \vec{V}_n = 0, P'_n = 0$;

– на боковых проницаемых границах: $u'_n = 0, w'_n = 0, P'_n = 0$;

– на источнике: $u = U, w = W, P'_n = 0$;

где $\vec{V} = \{u, v\}$ – значение компонент вектора скорости, P – давление, U, W – компоненты вектора скорости на источнике, ρ – плотность, $\mu = \mu(\varepsilon, n_l)$ – коэффициент турбулентного обмена, зависящий от проницаемости и видового состава лесного насаждения, M – молярная масса, R – универсальная газовая постоянная, τ_x, τ_z – составляющие касательного тангенциального напряжения, T – температура.

Согласно методу поправки к давлению [11, 12] исходная модель гидродинамики (1, 2) разбивается на три подзадачи. Первая подзадача представлена уравнением диффузии–конвекции–реакции, на основе которого рассчитываются компоненты поля скорости на промежуточном слое по времени

$$\varepsilon \frac{\tilde{u} - u}{h_t} + u\varepsilon \tilde{u}'_x + w\varepsilon \tilde{u}'_z = (\mu\varepsilon \tilde{u}'_x)'_x + (\mu\varepsilon \tilde{u}'_z)'_z, \quad \varepsilon \frac{\tilde{w} - w}{h_t} + u\varepsilon \tilde{w}'_x + w\varepsilon \tilde{w}'_z = (\mu\varepsilon \tilde{w}'_x)'_x + (\mu\varepsilon \tilde{w}'_z)'_z. \quad (4)$$

Для аппроксимации по временной переменной уравнения диффузии – конвекции – реакции использованы схемы с весами. Здесь $\tilde{u} = \sigma \tilde{u} + (1 - \sigma)u$, $\sigma \in [0,1]$ – вес схемы [13].

Опишем граничные условия системы (4): на непроницаемой границе: $\rho_w \eta u'_n = \tau_{x,b}(t), \rho_w \eta v'_n = \tau_{z,b}(t)$, на боковых проницаемых границах: $u'_n = 0, w'_n = 0$, на источнике: $u = U, w = W, P'_n = 0$. Вторая подзадача позволяет рассчитать распределение давлений

$$\varepsilon \frac{\rho}{P} \frac{\partial P}{\partial t} = \varepsilon h_t P''_{xx} + \varepsilon h_t P''_{zz} + \varepsilon \frac{\rho}{T} \frac{\partial T}{\partial t} - (\varepsilon \rho \tilde{u})'_x - (\varepsilon \rho \tilde{w})'_z + (\varepsilon \mu \rho'_x)'_x + (\varepsilon \mu \rho'_z)'_z + \varepsilon I_\rho. \quad (5)$$

Третья подзадача позволяет по явным формулам определить распределение скоростей на верхнем временном слое

$$\varepsilon \frac{\hat{u} - \tilde{u}}{h_t} = -\frac{1}{\rho} (\varepsilon \bar{P})'_x, \quad \varepsilon \frac{\hat{w} - \tilde{w}}{h_t} = -\frac{1}{\rho} (\varepsilon \bar{P})'_z, \quad (6)$$

где h_t – шаг по временной координате, u – значение поля скорости на предыдущем слое по времени, \tilde{u} – значение поля скорости на промежуточном слое по времени, \hat{u} – на текущем слое по времени.

Следует отметить, что при расчете давления учитывается сжимаемость среды, тепловое расширение, источники вещества, связанные с переходом воды из жидкого состояния в газообразное и обратно, а так же турбулентное перемешивание многокомпонентной воздушной среды. При расчете полей плотности вещества и температур источники, вызванные расширением (сжимаемостью) среды присутствует в операторе конвективного переноса.

3.2 Аппроксимация задачи аэродинамики приземного слоя атмосферы

Для построения дискретной модели движения воздушной среды, рассмотрим расчетную область, которая вписана в прямоугольник. Покроем область равномерной прямоугольной расчетной сеткой: $\omega = \omega_t \times \omega_x \times \omega_y$: $\omega_t = \{t^n = nh_t, 0 \leq n \leq N_t - 1, l_t = h_t (N_t - 1)\}$, $\omega_x = \{x_i = ih_x, 0 \leq i \leq N_x - 1, l_x = h_x (N_x - 1)\}$, $\omega_y = \{y_j = jh_y, 0 \leq j \leq N_y - 1, l_y = h_y (N_y - 1)\}$, где n, i, j – индексы по временной координате и пространственным координатным направлениям Ox, Oy соответственно; h_t, h_x, h_y – шаги по временной координате и пространственным координатным направлениям Ox, Oy соответственно; N_t, N_x, N_y – количество узлов по временной координате и пространственным координатным направлениям Ox, Oy соответственно; l_t, l_x, l_y – длина расчетной области по временной координате и пространственным координатным направлениям Ox, Oy соответственно.

Для аппроксимации задачи движения воздушной среды будем учитывать заполненность ячеек. В связи со сложной геометрией расчетной области учет заполненности ячеек повысит точность решения.

Дискретные аналоги операторов конвективного uc'_x и диффузионного $(\mu c'_x)'_x$ переноса в случае частичной заполненности ячеек с граничными условиями третьего рода $c'_n(x, y, t) = \alpha_n c + \beta_n$ могут быть записаны в следующем виде [14, 15]:

$$(q_0)_{i,j} uc'_x \square (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x},$$

$$(q_0)_{i,j} (\mu c'_x)'_x \square (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2} - \left| (q_1)_{i,j} - (q_2)_{i,j} \right| \mu_{i,j} \frac{\alpha_x c_{i,j} + \beta_x}{h_x},$$

где q_0, q_1, q_2 – коэффициенты заполненности контрольных областей.

Аппроксимация первого уравнения системы (4) запишется в виде [16, 17]:

$$(q_0)_{i,j} \frac{\tilde{u}_{i,j} - u_{i,j}}{h_t} + (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{\bar{u}_{i+1,j} - \bar{u}_{i,j}}{2h_x} + (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{\bar{u}_{i,j} - \bar{u}_{i-1,j}}{2h_x} + (q_3)_{i,j} w_{i,j+1/2} \frac{\bar{u}_{i,j+1} - \bar{u}_{i,j}}{2h_y} +$$

$$+ (q_4)_{i,j} w_{i,j-1/2} \frac{\bar{u}_{i,j} - \bar{u}_{i,j-1}}{2h_y} = (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{\bar{u}_{i+1,j} - \bar{u}_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{\bar{u}_{i,j} - \bar{u}_{i-1,j}}{h_x^2} + (q_3)_{i,j} \mu_{i,j+1/2} \frac{\bar{u}_{i,j+1} - \bar{u}_{i,j}}{h_y^2} -$$

$$- (q_4)_{i,j} \mu_{i,j-1/2} \frac{\bar{u}_{i,j} - \bar{u}_{i,j-1}}{h_y^2} + \left((q_3)_{i,j} - (q_4)_{i,j} \right) \frac{\tau_x}{\rho h_y} (m_1)_{i,j}, \quad (7)$$

Параметр m_1 принимает значение 1 в случае, если узел (i, j) принадлежит множеству граничных узлов, находящихся в придонной области, в противном случае $m_1 = 0$. Аналогичным образом получим дискретный аналог для второго уравнения системы.

С учетом несложных выкладок аппроксимация первого уравнения системы (6) примет вид:

$$(q_0)_{i,j} \frac{\hat{u}_{i,j} - \tilde{u}_{i,j}}{h_t} = -(q_1)_{i,j} \frac{\bar{P}_{i+1,j} - \bar{P}_{i,j}}{2h_x \rho_{i,j}} - (q_2)_{i,j} \frac{\bar{P}_{i,j} - \bar{P}_{i-1,j}}{2h_x \rho_{i,j}}. \quad (8)$$

Для решения сеточных уравнений используем адаптивный попеременно-треугольный итерационный метод.

Аппроксимация уравнения (5) примет вид:

$$\begin{aligned} (q_0)_{i,j} \frac{\rho_{i,j}}{P_{i,j}} \frac{\hat{P}_{i,j} - P_{i,j}}{h_t} = h_t \left((q_1)_{i,j} \frac{\hat{P}_{i+1,j} - \hat{P}_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \frac{\hat{P}_{i,j} - \hat{P}_{i-1,j}}{h_x^2} + (q_3)_{i,j} \frac{\hat{P}_{i,j+1} - \hat{P}_{i,j}}{h_z^2} - (q_4)_{i,j} \frac{\hat{P}_{i,j} - \hat{P}_{i,j-1}}{h_z^2} \right) + \\ + \frac{\rho_{i,j}}{T_{i,j}} \frac{\hat{T}_{i,j} - T_{i,j}}{h_t} - \frac{(q_1)_{i,j} (\rho u)_{i+1/2,j} - (q_2)_{i,j} (\rho u)_{i-1/2,j}}{h_x} - \frac{(q_3)_{i,j} (\rho w)_{i,j+1/2} - (q_4)_{i,j} (\rho w)_{i,j-1/2}}{h_z} - \\ - (\rho U)_{i,j} \frac{(q_2)_{i,j} - (q_1)_{i,j}}{h_x} - (\rho W)_{i,j} \frac{(q_4)_{i,j} - (q_3)_{i,j}}{h_z} + (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{\rho_{i+1,j} - \rho_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{\rho_{i,j} - \rho_{i-1,j}}{h_x^2} + \\ + (q_3)_{i,j} \mu_{i,j+1/2} \frac{\rho_{i,j+1} - \rho_{i,j}}{h_z^2} - (q_4)_{i,j} \mu_{i,j-1/2} \frac{\rho_{i,j} - \rho_{i,j-1}}{h_z^2} + (q_0)_{i,j} I_\rho, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\{U, W\}$ – значение компонентов вектора скорости в граничных узлах расчетной области. В случае непроницаемой границы параметры U и W равны нулю. В случае проницаемой границы параметры U, W равны u, w соответственно. Также компоненты U, W могут быть заданы.

3.3 Дискретная модель транспорта ЗВ в воздушной среде

Для описания процессов переноса ЗВ в работе используются уравнения, учитывающие такие факторы как переход воды из жидкого состояния в газообразное и обратно, а также в процессе транспорта примесей взвешенные частицы осаждаются.

Запишем систему уравнений, описывающую процессы переноса примеси в многокомпонентной воздушной среде, в следующем виде [16]:

$$\varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial t} + u\varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} + w\varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_0}{\partial z} \right), \quad i = 0, 2, \quad (10)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + u\varepsilon \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} + w\varepsilon \frac{\partial \varphi_1}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_1}{\partial z} \right) + \frac{v_g}{\rho_n} \varepsilon, \quad (11)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \varphi_2}{\partial t} + u\varepsilon \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} + w\varepsilon \frac{\partial \varphi_2}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_2}{\partial z} \right) + f\varepsilon - \varepsilon(1-\varepsilon)\alpha_2\varphi_2, \quad (12)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \varphi_3}{\partial t} + u\varepsilon \frac{\partial \varphi_3}{\partial x} + (w-w_0)\varepsilon \frac{\partial \varphi_3}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_3}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_3}{\partial z} \right) - \frac{v_g}{\rho_3} \varepsilon - \varepsilon(1-\varepsilon)\alpha_3\varphi_3, \quad (13)$$

$$\varepsilon \frac{\partial \varphi_4}{\partial t} + u\varepsilon \frac{\partial \varphi_4}{\partial x} + (w-w_0)\varepsilon \frac{\partial \varphi_4}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_4}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu\varepsilon \frac{\partial \varphi_4}{\partial z} \right) - \varepsilon(1-\varepsilon)\alpha_4\varphi_4, \quad (14)$$

где $v_g = f(\rho_n - \rho_1)$ – массовая скорость испарения, ε – параметр, описывающий проницаемость, $\mu = \mu(\varepsilon, n_i)$ – коэффициент турбулентного обмена, зависящий от проницаемости и видового состава лесного насаждения, ρ_n – плотность насыщенных паров, φ_i – объемные доли i -ой фазы ($i = 0$ – воздух, 1 – вода в газообразном состоянии, 2 – газ на источнике, 3 – вода в жидком состоянии, 4 – сажа), α_i – коэффициент скорости абсорбции.

Соответствующие системе уравнений (10) – (14) граничные условия имеют вид:

$$(\varphi_i)'_n(t, x, y, z) \Big|_{(x,y,z) \in \Gamma} = 0.$$

Уравнение для расчета скорости абсорбции имеет вид:

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} = \beta_{1,i}(\alpha_0 - \alpha_i) - \beta_{2,i}\varphi_i\alpha_i, \quad i = 2, 3, 4,$$

где $\beta_{1,i}$ – коэффициент, описывающий рост скорости абсорбции, $\beta_{2,i}$ – коэффициент, описывающий уменьшение скорости абсорбции за счет насыщения, α_0 – максимальное значение коэффициента скорости абсорбции, α_i – коэффициент скорости абсорбции.

Дискретный аналог системы уравнений (10)–(14) транспорта ЗВ на промежуточном временном слое с учетом частичной заполненности ячеек будет иметь вид:

$$\begin{aligned} (q_0)_{i,j} \frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{h_t} + u_{i+1/2,j} \frac{\varphi_{i+1,j}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j}^{n+\sigma}}{2h_x} (q_1)_{i,j} + u_{i-1/2,j} \frac{\varphi_{i,j}^{n+\sigma} - \varphi_{i-1,j}^{n+\sigma}}{2h_x} (q_2)_{i,j} + \widehat{w}_{i,j+1/2} \frac{\varphi_{i,j+1}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j}^{n+\sigma}}{2h_z} (q_3)_{i,j} + \\ + \widehat{w}_{i,j-1/2} \frac{\varphi_{i,j}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j-1}^{n+\sigma}}{2h_z} (q_4)_{i,j} = \mu_{i+1/2,j} \frac{\varphi_{i+1,j}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j}^{n+\sigma}}{h_x^2} (q_1)_{i,j} - \mu_{i-1/2,j} \frac{\varphi_{i,j}^{n+\sigma} - \varphi_{i-1,j}^{n+\sigma}}{h_x^2} (q_2)_{i,j} + \\ + \mu_{i,j+1/2} \frac{\varphi_{i,j+1}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j}^{n+\sigma}}{h_z^2} (q_3)_{i,j} - \mu_{i,j-1/2} \frac{\varphi_{i,j}^{n+\sigma} - \varphi_{i,j-1}^{n+\sigma}}{h_z^2} (q_4)_{i,j} + f_{i,j}(q_0)_{i,j} \end{aligned} \quad (15)$$

где $\widehat{w} = w$ для уравнений (10)–(12) и $\widehat{w} = w - w_0$ для (13), (14), $\sigma \in [0,1]$ – вес схемы.

3.4 Исследование консервативности модели движения многокомпонентной воздушной среды и устойчивости модели транспорта примеси

Выполнена проверка устойчивости разностных схем, предназначенных для математического моделирования транспорта ЗВ. Для исследования устойчивости был использован сеточный принцип максимума [18].

Таким образом, получены:

– ограничения на шаг по пространству: $h_x < 2 \min(\mu/|u|)$;

– ограничения на шаг по времени (получено из условия положительности коэффициентов сеточных уравнений согласно условиям применимости принципа максимума):

$$h_t < \left((1-\sigma)(4 \min(\mu(P))) / h_x^2 - (1-\sigma)((u(P))_x + (w(P))_z) / 2 \right)^{-1};$$

Для функций концентрации имеют место оценки: $\|\varphi_i^{n+1}\|_c \leq \|\varphi_i^0\|_c + h_t \sum_{k=0}^n \|f^k\|_c, i = 1..4$.

Для модели движения многокомпонентной воздушной среды справедливо балансовое соотношение:

$$\sum_{\substack{i \in [1, N_x - 1] \\ j \in [1, N_z - 1]}} (q_0)_{i,j} \frac{\widehat{T}_{i,j}}{T_{i,j}} \widehat{\rho}_{i,j} = \sum_{\substack{i \in [1, N_x - 1] \\ j \in [1, N_z - 1]}} (q_0)_{i,j} \frac{\widehat{T}_{i,j}}{T_{i,j}} \rho_{i,j} + h_t \sum_{\substack{i \in [1, N_x - 1] \\ j \in [1, N_z - 1]}} \left((q_0)_{i,j} I_\rho - (\rho U)_{i,j} \frac{(q_2)_{i,j} - (q_1)_{i,j}}{h_x} - (\rho W)_{i,j} \frac{(q_4)_{i,j} - (q_3)_{i,j}}{h_z} \right).$$

Из полученного выражения следует, что количество вещества $\sum_{\substack{i \in [1, N_x - 1] \\ j \in [1, N_z - 1]}} (q_0)_{i,j} \widehat{\rho}_{i,j}$ на текущем

временном слое зависит от количества вещества на предыдущем временном слое, от интенсивности внутренних и граничных источников и с точностью до членов порядка $O(h^2 + \tau)$ выполняется закон сохранения и превращения вещества.

4. Сопоставление результатов численных экспериментов и натуральных измерений по моделированию движения аэрозоли

4.1 Описание натурального эксперимента

Цель проведения натурального эксперимента заключается в сравнении исходных данных с результатами работы разработанного программного комплекса «AeroEcology», моделирующего физические процессы, рассматриваемые в работе. При проведении эксперимента измеряется распределение поля температуры нагретой аэрозоли от источника при помощи тепловизора. На

рис. 1 приведены две картины распределения температуры, полученные экспериментальным путем.

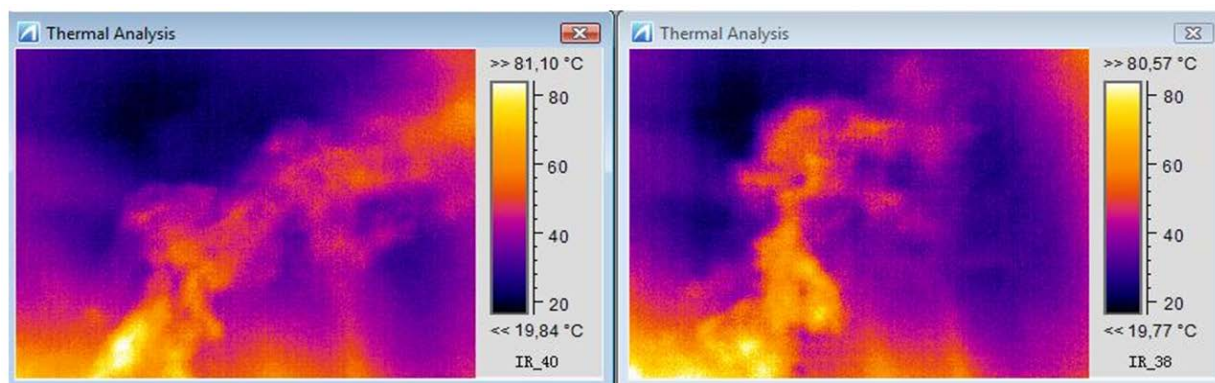


Рис. 1. Поле распределения температуры.

Для обработки результатов натурных измерений использована гипотеза о том, что поле температуры распределено по нормальному закону. При этом для описания распределения температуры необходимо иметь информацию о следующих параметрах, зависящих от вертикальной координаты: максимальное и минимальное значения температуры, расположение центра трубки тока аэрозоли (описывает математическое ожидание), ширину трубки тока (описывает среднее квадратичное отклонение).

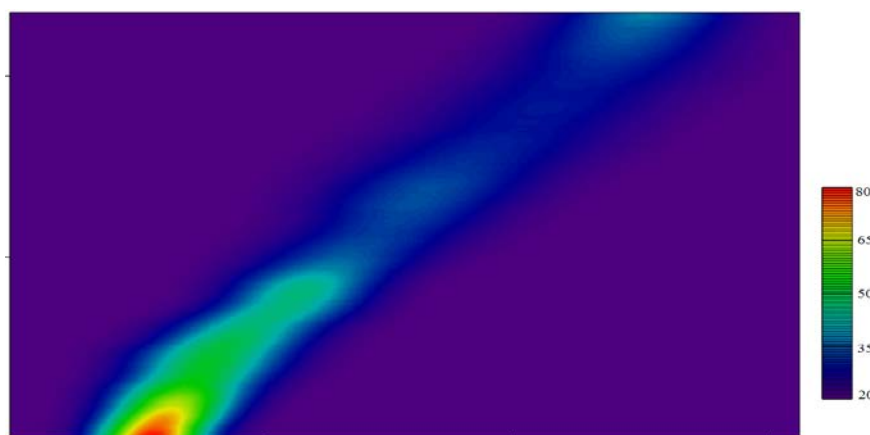


Рис. 2. Поле температуры со средними статистическими параметрами.

На рис. 2 представлено поле температуры со средними статистическими параметрами среди всех проведенных наблюдений: температуры в центре трубки тока, отклонение центра трубки тока от вертикали, ширины трубки тока. Поле температуры, приведенное на рис. 2 являлось эталоном при верификации численной модели.

4.2 Описание логической структуры разработанного программного комплекса «AeroEcology» и его параллельная реализация

На основе построенных алгоритмов был создан комплекс программ «AeroEcology», предназначенный для численного моделирования движения многокомпонентной воздушной среды. Для верификации построенного комплекса программ «AeroEcology» был проведен численный эксперимент и выполнено сопоставление натурных данных с результатами численных экспериментов. При решении задачи были использованы расчетные сетки размерами 300×200 . Шаги по пространственным переменным равны 1 см., скорость движения воздушной среды на левой границе задавалась равной 1,4 м/с. Для решения задачи применены схемы с весами, при этом вес схемы задавался равным 0,5. Шаг по временной переменной равен 0,001 с., расчетный временной интервал составлял 5с. На рис. 3 палитрой показана температура аэрозоли.

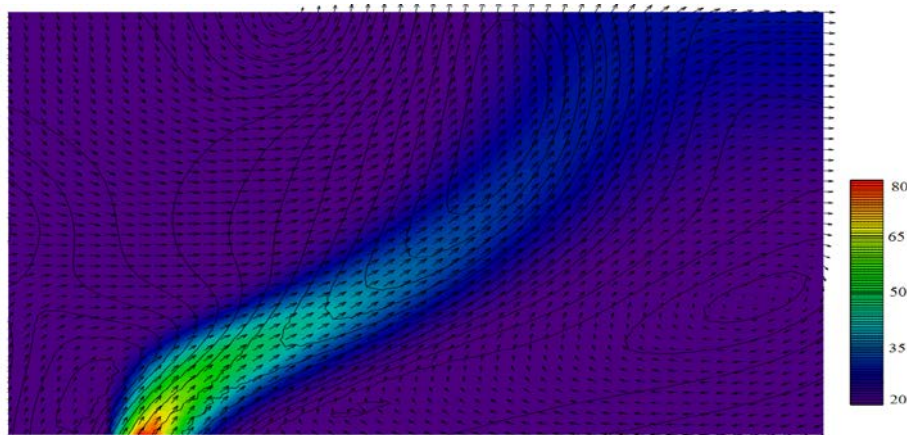


Рис. 3. Поле температуры аэрозоли.

При моделировании транспорта аэрозоли (результаты численных экспериментов приведены на рис. 3) в граничных условиях использованы параметры, полученные на основе натуральных экспериментов (рис.2).

Для решения задачи транспорта многокомпонентной воздушной среды использован адаптивный модифицированный попеременно-треугольный метод (МПТМ) минимальных поправок. При параллельной реализации использованы методы декомпозиции сеточных областей для вычислительно трудоемких задач диффузии-конвекции, учитывающие архитектуру и параметры многопроцессорной вычислительной системы РОЦ НИТ ЮФУ. Пиковая производительность МВС составляет 18.8 TFlops. В качестве вычислительных узлов используется 128 однотипных 16-ядерных Blade-серверов HP ProLiant BL685c, каждый из которых оснащен четырьмя 4-ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и оперативной памятью в объеме 32ГБ. Схему итерационного двухслойного модифицированного попеременно-треугольного метода запишем в следующем виде [19]:

$$y^{n+1} = y^n - \tau_{n+1} w^n, (D + \omega R_1) D^{-1} (D + \omega R_2) w^n = r^n, r^n = Ay^n - f,$$

где r^n - вектор невязки, w^n - вектор поправки.

Для параллельной реализации адаптивного МПТМ использованы методы декомпозиции области по одному направлению. Наиболее трудоемким расчетом с точки зрения построения параллельной программной реализации является расчет вектора поправки. Он выполняется в два шага: 1) $(D + \omega R_1) y^n = r^n$, 2) $(D + \omega R_2) w^n = Dy^n$.

На первом шаге рассчитываются элементы вспомогательного вектора y^n снизу вверх, а затем, зная вектор y^n , рассчитываются элементы вектора поправки w^n сверху вниз. Идея расчета вектора поправки представлена на рис. 4. Стрелками показано направление счета и передачи.

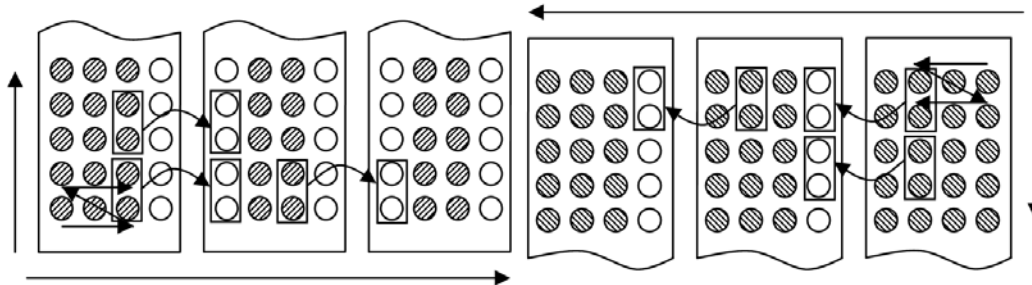


Рис. 4. Схема расчета вектора поправки (слева показана схема расчета вектора y^n , справа вектора поправки)

В схеме для расчета вектора y^m только первый процессор не требует дополнительной информации и может независимо от других процессоров посчитать свою часть области, остальные процессоры ждут от предыдущего, пока он не передаст элементы стоящие вначале строки. Передача по одному элементу не оптимальна т.к. появляются временные затраты связанные с

организацией передач, суммарное время на накладные расходы можно уменьшить путем увеличения объема передач. Данные рассуждения используются для расчета вектора поправки.

Результаты использования многопроцессорных технологий для расчета полей течений приведены в таблице 1.

Таблица 1

| Количество ядер | Время, с | Ускорение | Эффективность |
|-----------------|----------|-----------|---------------|
| 1 | 1447.415 | 1 | 1 |
| 2 | 734.728 | 1.97 | 0.985 |
| 4 | 387.009 | 3.74 | 0.935 |
| 8 | 199.643 | 7.25 | 0.906 |
| 16 | 109.653 | 13.2 | 0.825 |
| 32 | 62.659 | 23.1 | 0.722 |
| 64 | 36.643 | 39.5 | 0.617 |

Теоретически получены оценки ускорения и эффективности параллельного алгоритма, зависящие от времени выполнения арифметической операции, времени передачи данных и латентности. Практически максимальное ускорение достигалась на 64-ти узлах и равнялась 39,5.

4.3 Верификация математической модели приземной аэродинамики

Для верификации разработанной математической модели аэродинамики проведен ряд численных экспериментов и выполнено сопоставление результатов расчетов с расчетами, выполненными в среде ANSYS.

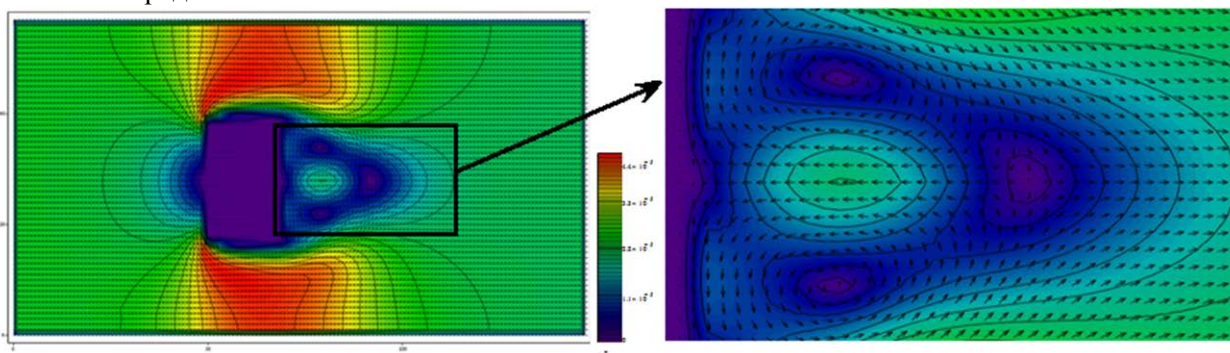


Рис. 5. Интенсивность движения воздушной среды (м/с) при горизонтальном сечении области.

На рис. 5, 6 показана интенсивность движения воздушной среды, реализованных в среде разработанного программного комплекса «AeroEcology» и в среде ANSYS. Из увеличенных областей наблюдается качественное совпадение результатов расчета, что свидетельствует о валидности комплекса программ «AeroEcology».

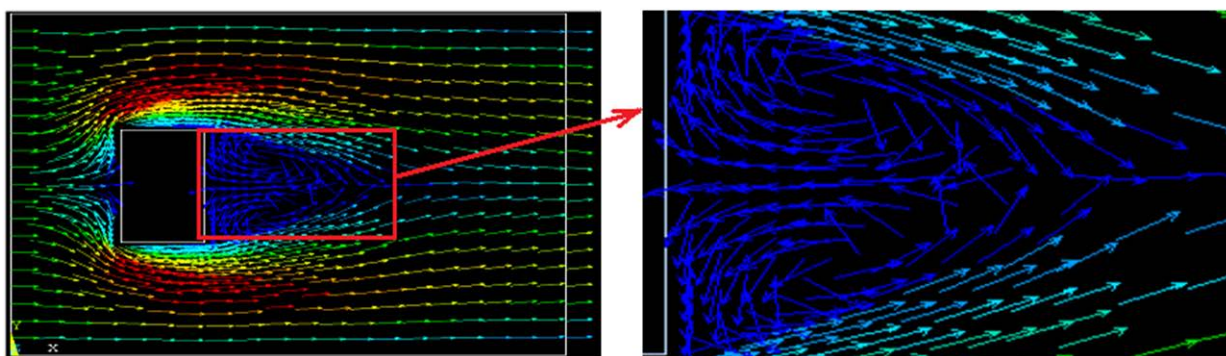


Рис. 6. Расчет скорости движения воздушной среды в среде ANSYS. Горизонтальное сечение.

Результаты численного эксперимента по моделированию транспорта аэрозоли, приведенные на рис. 3 на качественном уровне совпадают с результатами натуральных наблюдений (рис.2). Ниже приведены результаты верификации математической модели и количественные оценки.

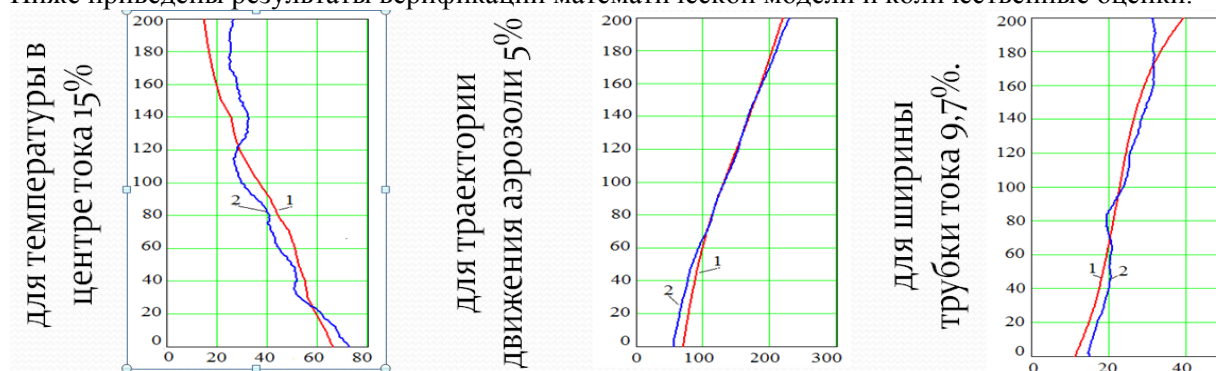


Рис. 7. Сопоставление численных экспериментов (кривая 1) с натурными данными (кривая 2).

На рис. 7 показано сопоставление для следующих параметров: а) температуры в центре трубки тока, б) траектории движения аэрозоли, в) ширины трубки тока. Отклонение результата расчета от натуральных данных составило: для температуры в центре тока 15%, для траектории движения аэрозоли 5% и для ширины трубки тока 9,7%.

5. Моделирование распространения примеси в прибрежной зоне воздушной среды

Проведен вычислительный эксперимент по моделированию распространение примеси от автотранспорта в прибрежном районе города Таганрог. Исходными данными являются: плотность воздушной среды $1,29 \text{ кг/м}^3$; плотность выброса $1,4 \text{ кг/м}^3$; температура окружающей среды 20°C ; температура выброса 120°C ; скорость течения воздушной среды 1 м/с в направлении прибрежной зоны; удельная мощность выброса 5 л/с .

При решении модельной задачи были использованы расчетные сетки размерами 300×80 . Шаги по пространственным переменным равны 1 м ., скорость движения воздушной среды на левой границе задавалось равной 1 м/с . Для решения модельной задачи применены схемы с весами, при этом вес схемы задавался равным $0,5$. Шаг по временной переменной равен $0,1 \text{ с}$., расчетный временной интервал составлял 300 с . На рис. 8 приведен результаты численного эксперимента по моделированию движения ЗВ без учета лесных насаждений.

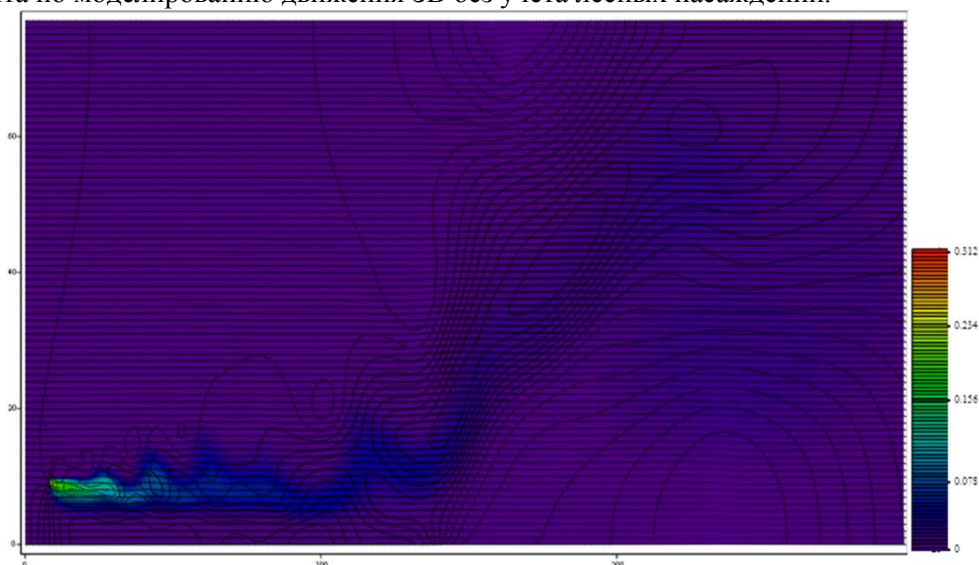


Рис. 8. Поле концентраций ЗВ через 300 с после начала выброса.

На рис. 9 приведен результаты численного эксперимента по моделированию движения ЗВ при наличии лесных насаждений. Коэффициент проницаемости воздушной средой лесных насаждений составляет 50%. Высота насаждения составляет 30 м., ширина области насаждения – 50 м. При решении задачи использованы расчетные сетки размерами 300×80 . Расчетный интервал составляет 300 с.

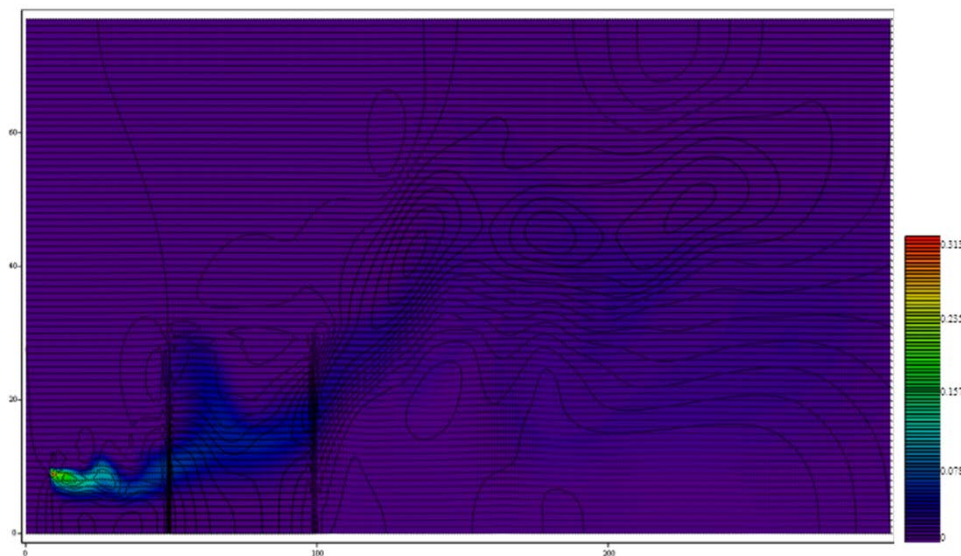


Рис. 9. Поле концентраций ЗВ через 300 с. после начала выброса.

Сопоставив рис. 8, 9 можно сказать, что при наличии лесных насаждений наблюдается более интенсивное перемешивание примесей в воздушной среде. Из рисунков также виден подъем разогретых ЗВ, обладающих более низкой плотностью по сравнению с окружающей средой в районе источника. Однако ЗВ осаждаются за счет уменьшения их температуры и увеличения плотности, значительная часть которых попадает в зону отдыха.

6. Заключение

Разработана непрерывная двумерная математическая модель движения многокомпонентной воздушной среды, которая учитывает такие факторы, как транспорт ЗВ и тепла; влияние растительного покрова; изменение коэффициента турбулентного обмена; переход воды из жидкого в газообразное состояние; осаждение вещества; изменение температуры за счет конденсации и испарения аэрозоли; турбулентное перемешивание многокомпонентной воздушной среды; теплообмен между жидкими и газообразными состояниями; наличие распределенных источников вещества и температуры; силу Архимеда; тангенциальное напряжение на границах раздела сред; переменную плотность, зависящую от концентрации загрязняющих веществ, температуры и давления; сжимаемость среды за счет: изменения температуры, испарения и конденсации жидкости, изменения давления, наличия источников. Отличительной особенностью разработанной математической модели движения воздушной среды является учет влияния растительного покрова и турбулентного перемешивания в уравнении неразрывности среды.

Предложены консервативные разностные схемы для модели многокомпонентной воздушной среды, учитывающие такие физические процессы, как турбулентное перемешивание многокомпонентной воздушной среды, наличие распределенных источников вещества и температуры, силу Архимеда, тангенциальное напряжение на границах раздела сред, переменную плотность, сжимаемость среды, изменение давления, наличие источников. Выполнено исследование погрешности аппроксимации, устойчивости и консервативности разработанных разностных схем.

Разработан и реализован комплекс программ «AeroEcology», учитывающий процессы теплообмена в прибрежной зоне воздушной среды и предназначенный для построения турбулентных потоков поля скорости многокомпонентной воздушной среды на сетках с высокой разрешающей способностью, а также для расчета концентрации ЗВ и транспорта тепла.

На основе разработанных моделей с использованием построенного комплекса программ «AeroEcology» выполнены численные эксперименты по прогнозированию распределения ЗВ в многокомпонентной воздушной среде прибрежной зоны г. Таганрога, результаты которых согласуются с натурными данными.

Литература

1. Монин А. С., Яглом А. М. О законах мелкомасштабных турбулентных движений жидкостей и газов, УМН, 18:5(113) (1963), 93–114
2. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.
3. Алоян А.Е. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере / Курс лекций. – М.: ИВМ РАН, 2002. – 201 с.
4. Воеводин В.В., Гергель В.П. Суперкомпьютерное образование: третья составляющая суперкомпьютерных технологий//Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2010. Т. 11, № 2. С.117-122.
5. Антонов А.С., Артемьева И.Л., Бухановский А.В., Воеводин В.В., Гергель В.П., Демкин В.П., Коньков К.А., Крукиер Л.А., Попова Н.Н., Соколинский Л.Б., Сухинов А.И. Проект "Суперкомпьютерное образование": 2012 год//Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2013. N 1-1. С. 12-16.
6. Chetverushkin B., Gasilov V., Iakobovski M., Polyakov S., Kartasheva E., Boldarev A., Abalakin I., Minkin A. Unstructured mesh processing in parallel CFD project GIMM// Вкниге: Parallel Computational Fluid Dynamics 2005 2006. С. 501-508.
7. Беклемышева К.А., Петров И.Б., Фаворская А.В. Численное моделирование процессов в твердых деформируемых средах при наличии динамических контактов с помощью сеточно-характеристического метода// Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 11. С. 3-16.
8. Якобовский М.В. Инкрементный алгоритм декомпозиции графов// Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия: Математическое моделирование и оптимальное управление. 2005. № 1. С. 243.
9. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Хачунц Д.С. Математическое моделирование движения многокомпонентной воздушной среды и транспорта загрязняющих веществ// Известия ЮФУ. Технические науки. –2011. №8(121). – С 73-79.
10. Четверушкин Б. Н. “Пределы детализации и формулировка моделей уравнений сплошных сред”, Матем. моделирование, 24:11 (2012).33–52.
11. Белоцерковский О.М., Гушин В.А., Щенников В.В. Метод расщепления в применении к решению задач динамики вязкой несжимаемой жидкости// Журнал вычислительной математики и математической физики. 1975. Т. 15. № 1. С. 197.
12. Гушин В.А., Матюшин П.В. Математическое моделирование и визуализация трансформации вихревой структуры течения около сферы при увеличении степени стратификации жидкости// Журнал вычислительной математики и математической физики. 2011. Т. 51. № 2. С. 268-281.
13. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Шишениа А.В. Оценка погрешности решения уравнения диффузии на основе схем с весами// Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 11. С. 53-64.
14. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Фоменко Н.А. Методика построения разностных схем для задачи диффузии-конвекции-реакции, учитывающих степень заполненности контрольных ячеек // Известия Южного федерального университета. Технические науки. 2013. № 4. С. 87-98.
15. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Тимофеева Е.Ф., Шишениа А.В. Математическая модель расчета прибрежных волновых процессов//Математическое моделирование. -2012. -Т.24, №8, - С. 32-44.
16. Сухинов А.И., Хачунц Д.С. Программная реализация двумерной задачи движения воздушной среды // Известия Южного федерального университета. Технические науки. 2013. № 4. С. 15-20.

17. Чистяков А.Е., Хачунц Д.С. Задача движения многокомпонентной воздушной среды с учетом парообразования и конденсации // Известия Южного федерального университета. Технические науки. 2013. № 4. С. 87-98.
18. Самарский А.А. Теория разностных схем. М. Наука, 1989.
19. Самарский А.А. Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. –М.: Наука, – 1978 – 588 с.