УДК 519.86

А.И. Сухинов, Д.С. Хачунц

ЗАДАЧА ДВИЖЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ВОЗДУШНОЙ СРЕДЫ С УЧЕТОМ ПАРООБРАЗОВАНИЯ И КОНДЕНСАЦИИ

Поставлена задача движения многокомпонентной воздушной среды с учетом парообразования и конденсации. Одной из актуальных проблем современной физики атмосферы являются математическое моделирование изменчивости газового и аэрозольного состава атмосферы, а также оценка влияния атмосферных примесей на окружающую среду. 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.

Многие процессы трансформации газовых примесей и аэрозолей протекают в турбулентной атмосфере, поэтому решение задачи о распространении примесей необходимо проводить совместно с гидродинамическими моделями.

Многокомпонентная воздушная среда; конденсация; парообразование.

A.I. Sukhinov, D.S. Khachunts

MULTICOMPONENT AIR MOTION TASK INCLUDING CONDENSATION AND EVAPORATION

The task of this research is multicomponent air motion including condensation and evaporation. One of the topical issues of the contemporary aerophysics is mathematical modelling of gas and aerosol atmosphere composition variation and the evaluation of air pollutants influence on the environment. The atmosphere is a complicated dynamic system in which different dynamic and physicochemical processes take place. These processes ate determined both by the atmosphere circulation and gas and aerosol pollutants transformation. Many processes of gas and aerosol pollutants transformation take place in the turbulent atmosphere therefore the task for pollutants spread should be solved taking into account the hydrodynamic models.

Multicomponent air; condensation; evaporation.

Введение. Количество газообразных и твердых примесей в виде пыли и сажи зависит от характера выбросов в атмосферу, условий разбавления и процессов самоочищения. На концентрацию вредных веществ в атмосфере влияют скорость и направление господствующих ветров, температура, влажность воздуха, осадки, количество, качество и высота выбросов в атмосферу и т.д. Пространственная изменчивость газовых примесей и аэрозолей характеризуется широким разнообразием масштабов.

Пусть расчетная область содержит источники тепла и загрязняющих веществ, учтем также наличие постоянных воздушных потоков.

Сформулируем уравнения гидродинамической модели атмосферных процессов.

Уравнение движения. Как известно, применяя закон сохранения массы к жидкости, протекающей через фиксированный бесконечно малый контрольный объем, получим уравнение неразрывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial \left(\rho v_j\right)}{\partial x_j} = v_g , \qquad (1)$$

где ρ – плотность жидкости.

Аналогичным образом из второго закона Ньютона следует уравнение для количества движения. Для всех газов, которые можно считать сплошной средой, а также для большинства жидкостей замечено, что напряжение в некоторой точке линейно зависит от скорости деформации жидкости. При этом допущении выводится уравнение Навье–Стокса

$$\frac{dv_i}{dt} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} v_i\right) - g_i \ , \tag{2}$$

где g – ускорение свободного падения; p – давление; v_i – проекции компонентов скорости на оси x_i.

Уравнение (2) рассматривается при следующих граничных условиях:

– на нижней поверхности

$$\vec{V}_n'(t,x,y)\Big|_{(x,y)\in\gamma} = 0, \ \vec{V}_n(t,x,y)\Big|_{(x,y)\in\gamma} = 0,$$

– на верхних и боковых границах

$$\vec{V}_n'(t,x,y)\Big|_{(x,y)\in\gamma} = 0, \ \vec{V}_n(t,x,y)\Big|_{(x,y)\in\gamma} = \vec{V}_0(t,x,y),$$

где $\vec{V} = \{u,v\}$, $\vec{V}_n$ – нормальная составляющая вектора скорости; $\vec{V}_0$ – значение вектора скорости на вертикальной и боковых границах расчетной области.

При соприкосновении поверхности жидкости с ее паром при данной температуре устанавливается определенное для каждой жидкости равновесное давление пара, называемое давлением насыщенного пара. Даже бесконечное малое увеличение давления пара над поверхностью жидкости приводит к конденсации пара на этой поверхности, а бесконечное малое уменьшение давления вызывает испарение жидкости с ее поверхности.

Для описания зависимости давления пара от температуры воспользуемся формулой Менделеева–Клапейрона

$$pV = \sum_i \nu_i RT \ \text{ или } \ P = \sum_i \frac{\rho_i}{M_i} RT \ , \tag{3}$$

где $\nu_i = m_i / M_i$; m – масса, M – молярная масса; R – универсальная газовая постоянная; V – объем; T – температура; ρ_i – плотность.

Продифференцируем уравнение состояния (3), в результате чего получим

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\rho}{P}\frac{\partial P}{\partial t} - \frac{\rho}{T}\frac{\partial T}{\partial t} \ . \tag{4}$$

Уравнение транспорта загрязняющих веществ. Смешение небольших движущихся вихрей с окружающей средой сопровождается переносом вещества. Уравнение транспорта примесей можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u\frac{\partial \rho}{\partial x_1} + v\frac{\partial \rho}{\partial x_2} + (w - w_0)\frac{\partial \rho}{\partial x_3} = \sum_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j}\rho\right)\right) + I$$

или

$$\frac{d\rho}{dt} - w_0\frac{\partial \rho}{\partial x_3} = \sum_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j}\rho\right)\right) + I \ ,$$

где I – функция, описывающая распределение и мощность источников примесей; w_0 – скорость осаждения; m – масса.

Принимая во внимание переход воды из жидкого состояния в газообразное и обратно, а также тот факт, что в процессе транспорта примесей взвешенные частицы осаждаются, запишем уравнения транспорта загрязняющих веществ в многокомпонентной воздушной среде

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_i \right) \right) , \ i = 0,2 , \frac{d\rho_1}{dt} = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_1 \right) + v_g ,$$

$$\frac{d\rho_3}{dt} - w_0 \frac{\partial \rho_3}{\partial x_3} = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_3 \right) - v_g , \tag{5}$$

$$\frac{d\rho_4}{dt} - w_0 \frac{\partial \rho_4}{\partial x_3} = \sum_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_4 \right) \right),$$

где $v_g = f\left(\rho_n - \rho_1\right)$ – массовая скорость испарения; ρ_n – плотность насыщенных паров; ρ_i – объемные доли i-й фазы (I = 0 – воздух, 1 – вода в газообразном состоянии, 2 – газ на источнике, 3 – вода в жидком состоянии, 4 – сажа).

Система уравнений (5) рассматривается при граничном условии

$$\rho_n'\left(t, x, y\right)\Big|_{(x,y)\in\gamma} = 0 .$$

Для определения скорости загрязняющих веществ воспользуемся силами трения и гравитации, которые действуют на них, т.е.

$$kw_0^2 - g\left(\rho_3 + \rho_4\right) = 0 \text{ или } w_0 = \sqrt{\frac{g}{k}\left(\rho_3 + \rho_4\right)} = w_s\sqrt{1 + \frac{\rho_3}{\rho_4}} ,$$

где w_s – скорость осаждения сажи.

Уравнения притока тепла (уравнения теплопроводности газа и конденсата). Дополним систему уравнением притока тепла, которое описывает процессы транспорта тепла и теплообмен. Данное уравнение можно записать в виде

$$\frac{dQ}{dt} - w_0 \frac{\partial Q}{\partial x_3} = \sum_j \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_j \frac{\partial}{\partial x_j} Q \right) \right) + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial}{\partial x_j} T \right) + I ,$$

где Q – тепловая энергия; λ – коэффициент теплопроводности; I – функция, описывающая распределение и мощность источников тепла; w_0 – скорость осаждения взвешенных частиц.

В случае многокомпонентности рассматриваемых сред для тепловой энергии и коэффициента теплопроводности справедливы формулы

$$Q = \sum_i Q_i = \sum_i \rho_i c_i T .$$

В зависимости от рассматриваемой задачи уравнение притока тепла представляют в различных формах. Для нашей задачи необходимы два уравнения – это уравнение теплопроводности газа, которое может быть представлено в виде

$$\left(\sum_{i=0}^{2} \rho_i c_{pi} \right) \frac{dT}{dt} = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\sum_{i=0}^{2} \rho_i c_{pi} \mu_j + \lambda_i \right) \frac{\partial}{\partial x_j} T \right) + q_2 v_g - \alpha_v \left(T - T_s \right) , \tag{6}$$

где ρ, c_p – плотность и теплоемкость газовой фазы; T, T_S – температура газовой и конденсированной фаз; q – удельная теплота парообразования; α_v – коэффициент теплопередачи; v_g – массовая скорость испарения, и уравнение теплопроводности для конденсата, которое имеет следующий вид:

$$\left(\sum_{i=3}^{4} \rho_i c_{pi} \right) \left(\frac{dT_s}{dt} - w_0 \frac{\partial T}{\partial x_3} \right) = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\sum_{i=3}^{4} \rho_i c_{pi} \mu_j \right) \frac{\partial}{\partial x_j} T_s \right) + \alpha_v \left(T - T_s \right) , \tag{7}$$

где c_{pi}, ρ_i , – удельные теплоемкости, истинные плотности и объемные доли i-й фазы; T, T_S – температура газовой и конденсированной фаз.

Уравнения теплопроводности (6), (7) рассматриваются при граничном условии

$$T'_n(t,x,y)\Big|_{(x,y)\in\gamma}=0\,.$$

Модель турбулентности. Движение большего числа мелких частиц сопровождается турбулентной диффузией, т.е. в процессе мелкомасштабного турбулентного перемешивания наблюдается перенос таких субстанций, как водяной пар, тепло, примеси и, до некоторой степени, количества движения, из областей с избытком этих свойств в области с недостатком тех же самых свойств. Турбулентная диффузия играет важную роль, поскольку весь водяной пар, большая часть тепла и различные примеси поступают в тропосферу от земной поверхности под влиянием турбулентности. Для ее описания воспользуемся моделью Абрамовича–Секундова, учитывающей такие важные факторы, как предыстория потока, конвективный и диффузионный перенос турбулентных пульсаций:

$$\frac{\partial v_{турб}}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3}v_i\frac{\partial v_{турб}}{\partial x_i}=\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\left(v_{мол}+kv_{турб}\right)\frac{\partial v_{турб}}{\partial x_i}\right)+v_{турб}f\left(\frac{v_{турб}}{8v_{мол}}\right)D-\gamma S,$$

$$S=\frac{v_{турб}\left(v_{мол}+\beta v_{турб}\right)}{L^2_{\min}},\quad D=\sqrt{\sum_{i=1}^{3}\sum_j\frac{\partial v_i}{\partial x_j}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)},\tag{8}$$

$$f(z)=0,2\frac{z^2+1,47z+0,2}{z^2-1,47z+1},$$

где $\kappa = 2,0$; $\gamma = 50,0$, $\beta = 0,06$; $L_{\min}$ – кратчайшее расстояние до твердой стенки; $\nu_{мол}$ – молекулярная вязкость, а $\nu_{турб}$ – турбулентная вязкость.

Уравнение (8) рассматривается при граничном условии

$$\left(v_{турб}\right)'_n(t,x,y)\Big|_{(x,y)\in\gamma}=0.$$

Задача расчета давления. Далее для удобства координатные оси будем обозначать x, y, z. Рассмотрим исходные уравнения гидродинамики:

– уравнение Навье–Стокса

$$\begin{aligned}
&u'_t+uu'_x+vu'_y+wu'_z=-\frac{1}{\rho}P'_x+\left(\mu u'_x\right)'_x+\left(\mu u'_y\right)'_y+\left(\mu u'_z\right)'_z+f_x,\\
&v'_t+uv'_x+vv'_y+wv'_z=-\frac{1}{\rho}P'_y+\left(\mu v'_x\right)'_x+\left(\mu v'_y\right)'_y+\left(\mu v'_z\right)'_z+f_y,\\
&w'_t+uw'_x+vw'_y+ww'_z=-\frac{1}{\rho}P'_z+\left(\mu w'_x\right)'_x+\left(\mu w'_y\right)'_y+\left(\mu w'_z\right)'_z+f_z;
\end{aligned}\tag{9}$$

– уравнение неразрывности (транспорта вещества)

$$\rho'_t+\left(u\rho\right)'_x+\left(v\rho\right)'_y+\left(w\rho\right)'_y=\left(\mu\rho'_x\right)'_x+\left(\mu\rho'_y\right)'_y+\left(\mu\rho'_z\right)'_z+v_g.\tag{10}$$

Для построения дискретного аналога гидродинамических процессов воспользуемся методом дробных шагов, согласно которому модель разбивается на две подзадачи. Первая задача описывается уравнением диффузии – конвекции:

$$\begin{aligned}
&\frac{\tilde u-u}{\tau}+uu'_x+vu'_y+wu'_z=\left(\mu u'_x\right)'_x+\left(\mu u'_y\right)'_y+\left(\mu u'_z\right)'_z+f_x,\\
&\frac{\tilde v-v}{\tau}+uv'_x+vv'_y+wv'_z=\left(\mu v'_x\right)'_x+\left(\mu v'_y\right)'_y+\left(\mu v'_z\right)'_z+f_y,
\end{aligned}\tag{11}$$

$$\frac{\tilde{w}-w}{\tau}+uw'_x+vw'_y+ww'_z=\left(\mu w'_x\right)'_x+\left(\mu w'_y\right)'_y+\left(\mu w'_z\right)'_z+f_z\,.$$

На основе системы уравнений (11) вычисляется поле скоростей на промежуточном временном слое. Второй задачей является расчет распределения скоростей на следующем временном слое с учетом давления:

$$\frac{\hat{u}-\tilde{u}}{\tau}=-\frac{1}{\rho}P'_x,\;\; \frac{\hat{v}-\tilde{v}}{\tau}=-\frac{1}{\rho}P'_y,\;\; \frac{\hat{w}-\tilde{w}}{\tau}=-\frac{1}{\rho}P'_z. \tag{12}$$

Умножим систему уравнений (12) на $\tau\rho$ и продифференцируем по переменным x, y, z соответственно, в результате чего получим

$$\left(\rho\hat{u}\right)'_x=\left(\rho\tilde{u}\right)'_x-\tau P''_{xx},\; \left(\rho\hat{v}\right)'_y=\left(\rho\tilde{v}\right)'_y-\tau P''_{yy},\; \left(\rho\hat{w}\right)'_z=\left(\rho\tilde{w}\right)'_z-\tau P''_{zz}. \tag{13}$$

Подставив систему уравнений (13) в уравнение (10), получим

$$\rho'_t+\left(\rho\tilde{u}\right)'_x-\tau P''_{xx}+\left(\rho\tilde{v}\right)'_y-\tau P''_{yy}+\left(\rho\tilde{w}\right)'_z-\tau P''_{zz}=$$

$$=\left(\mu\rho'_x\right)'_x+\left(\mu\rho'_y\right)'_y+\left(\mu\rho'_z\right)'_z+v_g\,. \tag{14}$$

С учетом выражения (4) уравнение (14) примет вид

$$\frac{\rho}{P}\frac{\partial P}{\partial t}=\tau P''_{xx}+\tau P''_{yy}+\tau P''_{zz}+\frac{\rho}{T}\frac{\partial T}{\partial t}-\left(\rho\tilde{u}\right)'_x-\left(\rho\tilde{v}\right)'_y-\left(\rho\tilde{w}\right)'_z+$$

$$+\left(\mu\rho'_x\right)'_x+\left(\mu\rho'_y\right)'_y+\left(\mu\rho'_z\right)'_z+v_g\,. \tag{15}$$

На основе уравнения (15) вычисляется поле давлений. 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 также турбулентное перемешивание многокомпонентной воздушной среды. При расчете полей плотности вещества и температур источники, вызванные расширением (сжимаемостью) среды, присутствуют в операторе конвективного переноса.

Выводы. В данной работе поставлена задача распространения загрязняющих веществ в многокомпонентной воздушной среде. Особенностью разработанной математической модели является учет большого числа физических процессов таких, как переход воды из жидкого в газообразное состояние, турбулентный обмен, осаждение вещества, теплообмен между жидкими и газообразными состояниями, переменная плотность, зависимость плотности воздушной среды от давления и температуры, транспорт загрязняющих веществ и тепла.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *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.
2. Алоян А.Е. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере / Курс лекций. – М.: ИВМ РАН, 2002. – 201 с.
3. *Алексеенко Е.В., Сидоренко Б.В., Колгунова О.В., Чистяков А.Е.* Сравнительный анализ классических и неклассических моделей гидродинамики водоемов с турбулентным обменом // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 8 (97). – С. 6-18.
4. *Володин Е.М.* Математическое моделирование общей циркуляции атмосферы: Курс лекций. – М.: ИВМ РАН, 2007. – 87 с.

5. *Чистяков А.Е., Алексеенко Е.В., Колгунова О.В.* Вычислительные эксперименты с математическими моделями турбулентного обмена в мелководных водоемах // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2008. – № 10 (87). – С. 171-175.
6. *Чистяков А.Е.* Трехмерная модель движения водной среды в Азовском море с учетом транспорта солей и тепла // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 8 (97). – С. 75-82.
7. *Чистяков А.Е., Алексеенко Е.В., Колгунова О.В.* Вычислительные эксперименты с математическими моделями турбулентного обмена в мелководных водоемах // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 10 (87). – С. 171-175.
8. *Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Алексеенко Е.В.* Численная реализация трехмерной модели гидродинамики для мелководных водоемов на супервычислительной системе // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23, № 3. – С. 3-21.
9. *Чистяков А.Е.* Теоретические оценки ускорения и эффективности параллельной реализации ПТМ скорейшего спуска // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 237-249.
10. *Сухинов А.И., Чистяков А.Е.* Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 1. – С. 3-21.
11. *Сухинов А.И., Чистяков А.Е.* Параллельная реализация трехмерной модели гидродинамики мелководных водоемов на супервычислительной системе // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии. – 2012. – Т. 13. – С. 290-297.
12. *Чистяков А.Е.* Об аппроксимации граничных условий трехмерной модели движения водной среды // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 66-77.
13. *Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Бондаренко Ю.С.* Оценка погрешности решения уравнения диффузии на основе схем с весами // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 8 (121). – С. 6-13.
14. *Сухинов А.И., Тимофеева Е.Ф. Чистяков А.Е.* Построение и исследование дискретной математической модели расчета прибрежных волновых процессов // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 8 (121). – С. 22-32.
15. *Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А.* Построение дискретной двумерной математической модели транспорта наносов // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 8 (121). – С. 32-44.
16. *Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А.* Двумерная гидродинамическая модель, учитывающая динамическое перестроение геометрии дна мелководных водоемов // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 8(121). – С .159-167.
17. *Дегтярева Е.Е., Чистяков А.Е.* Моделирование транспорта наносов по данным экспериментальных исследований в Азовском море // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2012. – № 2 (127). – С. 112-118.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор Я.Е. Ромм.

Сухинов Александр Иванович – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южный федеральный университет»; e-mail: sukhinov@gmail.com; 347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44; тел.: 89281021106; д.ф.-м.н.; профессор.

Хачунц Дианна Самвеловна – e-mail: diana-hachunts@mail.ru; тел.: 89287786737; аспирантка.

Sukhinov Alexander Ivanovich – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”; e-mail: sukhinov@gmail.com; 44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia; phone: +79281021106; dr. of phis.-math. sc.; professor.

Khachunts Dianna Samvelovna – e-mail: diana-hachunts@mail.ru; phone: +79287786737; postgraduate student.