

На правах рукописи



Ярцева Елена Павловна

**РАЗРАБОТКА И ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
РЕКУРСИВНО-ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ И АЛГОРИТМОВ В ЗАДАЧЕ
МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Воронеж - 2015

Работа выполнена в Северо – Кавказском федеральном университете

- Научный руководитель:** доктор физико - математических наук, доцент,
Наац Виктория Игоревна
- Официальные оппоненты:** **Шхануков-Лафишев Мухамед Хабалович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
Кабардино-Балкарский государственный
университет им. Х.М. Бербекова,
кафедра вычислительной математики, заведующий
- Сухинов Александр Иванович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
Таганрогский институт им. А.П. Чехова (филиал)
«Ростовского государственного экономического
университета (РИНХ)»,
кафедра математики, профессор
- Ведущая организация:** Кубанский государственный университет (г. Краснодар)

Защита состоится 20 мая 2015 года в 11.30 на заседании диссертационного совета Д 212.038.20 при ФГБОУ ВПО "Воронежский государственный университет" по адресу: 394006, г. Воронеж, Университетская пл., 1, ауд. 333.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Воронежского государственного университета: <http://www.science.vsu.ru/>

Автореферат разослан " " марта 2015 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета кандидат физико-
математических наук, доцент



Шабров Сергей Александрович

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования и степень разработанности. Прогноз состояния экологической системы атмосфера - подстилающая поверхность, подвергающейся воздействию антропогенных факторов, является актуальной задачей науки в настоящее время [1–3]. Подобные системы достаточно сложные, поскольку обладают свойствами многомерности, неполной предсказуемости их поведения, обусловленной стохастичностью происходящих в них процессов. Это существенно затрудняет проведение натуральных экспериментов с такими системами. Поэтому важную роль в исследовании подобных систем играют их математическое моделирование, проведение вычислительных экспериментов и комплексный мониторинг. Научные направления, связанные с математическим моделированием в задачах охраны окружающей среды, давно развиваются в нашей стране и за рубежом и являются, несмотря на все достижения в этой области, актуальными и в настоящее время. Основоположником данного направления по праву считают академика Марчука Г.И. Значительные достижения в этой области принадлежат ученым НИИ Прикладной математики РАН, академику Дымникову В.П., профессорам Алояну А.Е., Пененко В.В. и др. В последнее время значительные научные результаты получены учеными таких научных школ как, школа профессора Угольницкого Г.А. и профессора Сухинова А.И. (Южный федеральный университет), профессора Нааца И.Э. (Северо-Кавказский федеральный университет), профессора Семенчина Е.А. (Кубанский государственный университет). Тем не менее, несмотря на имеющиеся достижения, не все научные проблемы до конца еще решены.

В процессе математического моделирования переноса загрязняющих примесей в атмосфере возникают следующие проблемы и задачи, требующие решения. Это, прежде всего, задача совместного использования приближенных данных мониторинга и математических моделей, что составляет содержание проблемы обеспечения математических моделей исходными данными. Следующая проблема обусловлена невозможностью непосредственных натуральных измерений некоторых характеристик природной среды, например атмосферной турбулентности, что приводит к неопределенности исходных данных. Для решения этой проблемы требуется привлечение полуэмпирических расчетных формул или дополнительных приближенных данных. Также касается и оценки значений производных соответствующих распределений в уравнении массопереноса на основе приближенно заданных исходных данных или функций, что приводит к необходимости решения некорректно поставленных задач и разработке соответствующих регуляризирующих численных методов и алгоритмов. Актуальной задачей также является создание соответствующего программного комплекса. Таким образом, остается актуальной задача построения устойчивых вычислительных моделей, способных воспринимать эмпирические данные, разработка расчетно-аналитических и качественных моделей для оценки экологического состояния воздушной среды, например, вблизи промышленных предприятий, создание соответствующего программно-алгоритмического обеспечения. Обозначенные выше проблемы в той или иной мере решаются в данной диссертации, что обуславливает актуальность ее темы.

Объектом исследования является пространственно-временное распределение поля концентрации загрязняющих примесей, распространяющихся в пограничном слое атмосферы и соответствующее уравнение диффузного переноса, описывающее данный процесс.

Предметом исследования являются методы моделирования диффузного переноса примесей в пограничном слое атмосферы, соответствующие численные методы и модели, программно-алгоритмическое обеспечение.

Целью диссертационного исследования является разработка и исследование численных методов и алгоритмов в задаче моделирования диффузного переноса загрязняющих примесей в по-

граничном слое атмосферы, способных воспринимать приближенные данные экологического мониторинга, и создание системы компьютерного моделирования применительно к проблеме экологического прогноза состояния пограничного слоя атмосферы.

Методы исследования: теория и методы математического моделирования, численные методы решения линейных многомерных дифференциальных уравнений в частных производных и интегральных уравнений, методы теории аппроксимации, алгоритмов и программирования.

Задачи диссертационного исследования:

в области математического моделирования:

1. в рамках проблемы обеспечения математических моделей исходными данными для одномерного параметризованного уравнения переноса загрязняющих примесей в атмосфере предложить и построить первую качественную расчетно-аналитическую модель оценки концентрации примесей на основе фундаментальной системы решений однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами; разработать вторую качественную модель расчета концентрации примесей на основе представления искомого решения интегральным уравнением Вольтерра второго рода и численного метода последовательных приближений;

в области численных методов и методов алгоритмизации:

2. для одномерного параметризованного уравнения переноса примесей построить итерационно-рекурсивные алгоритмы для первой и второй качественных моделей соответственно; на основе конечно-разностного метода и численных методов решения СЛАУ разработать алгоритмы тестовых примеров для одномерного и трехмерного уравнений переноса соответственно, а также алгоритмы численного исследования вычислительных схем на сходимость и устойчивость к погрешностям в исходных данных;

3. на основе численного метода покоординатного расщепления трехмерного параметризованного уравнения переноса и итерационно-рекурсивных методов и алгоритмов, построенных первоначально для одномерной задачи, выполнить построение вычислительных алгоритмов для решения пространственной задачи переноса;

в области разработки программного обеспечения и вычислительного эксперимента:

4. на основе методики тестирования алгоритмов и программ выполнить постановку и провести вычислительный эксперимент по исследованию свойств рекурсивно-итерационных алгоритмов решения одномерной задачи переноса, таких как сходимость и устойчивость к погрешностям в исходных данных; по исследованию влияния различных значений скорости ветра, турбулентности и других характеристик состояния пограничного слоя атмосферы на пространственно-временное распределение поля концентрации загрязняющих примесей на примере решения пространственной задачи переноса;

5. предложить концептуальную схему информационно-вычислительного обеспечения задач переноса загрязняющих примесей в атмосфере и на ее основе разработать систему компьютерного моделирования пространственно-временной изменчивости поля концентрации.

Положения, выносимые на защиту:

в области математического моделирования:

1. Расчетно-аналитическая качественная модель для параметризованного уравнения переноса загрязняющих примесей в пограничном слое атмосферы с приближенно заданными исходными данными, основанная на использовании фундаментальных решений однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами, позволяющая выполнять качественную оценку значений параметров соответствующей математической модели, получать простые аналитические решения и строить соответствующие алгоритмы исходной задачи (п.1,2,3 паспорта специальности);

2. Расчетно-аналитическая качественная модель для параметризованного уравнения переноса примесей в атмосфере с приближенно заданными исходными данными, построенная на основе сведения систем дифференциальных уравнений к эквивалентным системам интегральных уравнений Вольтерра второго рода с последующим введением в структуру вычислительных моделей рекурсивно-итерационных алгоритмов, что повышает их устойчивость к погрешностям в исходных данных и эффективность (п.1,2,3 паспорта специальности);

в области численных методов и методов алгоритмизации:

3. Вычислительная модель для пространственной задачи переноса, основанная на численном методе покоординатного расщепления трехмерного параметризованного уравнения переноса с учетом в нем уравнения неразрывности, в структурную схему которой включены итерационно-рекурсивные алгоритмы соответствующих расчетно-аналитических качественных моделей, построенных первоначально для одномерной задачи (п.1,2,3 паспорта специальности);

в области разработки программного обеспечения и вычислительного эксперимента:

4. Методика, реализованная на основе разработанных тестовых примеров и программного обеспечения, и результаты вычислительного эксперимента по исследованию сходимости и устойчивости алгоритмов к погрешностям в исходных данных, а также исследованию влияния скорости ветра, турбулентности и других состояний атмосферы в пределах пограничного слоя на пространственно-временное распределение поля концентрации загрязняющих примесей (п.3,4,7 паспорта специальности);

5. Система компьютерного моделирования пространственно-временной изменчивости поля концентрации загрязнений в атмосфере (п.7 паспорта специальности).

Научная новизна. В работе получены следующие новые результаты:

1. В рамках проблемы обеспечения математических моделей исходными данными для одномерного параметризованного уравнения переноса загрязняющих примесей в атмосфере предложены две качественные расчетно-аналитические модели, первая из которых строится на основе фундаментальной системы решений однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами, а вторая – на основе представления искомого решения уравнения переноса интегральным уравнением Вольтерра второго рода и численного метода последовательных приближений, что позволяет выполнять качественную оценку значений параметров в задачах математического моделирования явления переноса примесей в системе атмосфера - подстилающая поверхность, решать проблему неопределенности исходных данных, получать простые аналитические решения и строить соответствующие алгоритмы исходной задачи, использовать полученные результаты моделирования в других более сложных вычислительных схемах, как некие предварительные исходные данные; разработаны соответствующие итерационные и рекурсивные вычислительные алгоритмы, устойчивые к погрешностям в исходных данных;

2. Для трехмерного параметризованного уравнения переноса примесей в атмосфере с учетом уравнения неразрывности построены вычислительные алгоритмы на основе численного метода покоординатного расщепления, в структуру которых включены итерационные и рекурсивные алгоритмы решения соответствующих одномерных задач;

3. На основе разработанного алгоритмического и программного обеспечения проведен вычислительный эксперимент, включающий в себя тестирование алгоритмов и программ с помощью специально созданных тестовых примеров, а также исследование влияния скорости ветра, турбулентности и других состояний пограничного слоя атмосферы на пространственно-временное распределение поля концентрации загрязняющих примесей, получены соответствующие результаты расчетов;

4. Предложена концепция информационно-вычислительного обеспечения задач экологического прогноза состояния воздушной среды, которая может быть включена, например, в состав системы «автоматизированное место специалиста-эколога» на станции экологического контроля, в соответствии с которой разработана система компьютерного моделирования пространственно-временной изменчивости поля концентрации загрязняющих примесей.

Степень достоверности научных положений и выводов обусловлена корректной математической постановкой рассматриваемых задач, использованием известных теоретических положений и методов теории «Уравнения математической физики», «Численные методы» и др. Представленные в диссертации результаты имеют математическое обоснование, проведены численные исследования сходимости и устойчивости вычислительных алгоритмов, сопоставление приближенных решений с точными решениями, моделируемыми с помощью специально разработанных тестовых задач. Результаты численных экспериментов, полученные на основе разработанного комплекса программ, согласуются с известными по литературным источникам данными натуральных экспериментов.

Научная и практическая значимость работы состоит в возможности дальнейшего использования созданного в ней математического, вычислительного, алгоритмического и программного обеспечения. Некоторые научные результаты диссертации использовались СРОО «Экологический Конгресс Ставрополья. Академия Экологической Безопасности» при разработке информационных систем мониторинга и прогноза экологического состояния атмосферы региона (Акт о внедрении от 26.09.2014 г.). Также результаты диссертационного исследования успешно апробированы в учебном процессе кафедры математического анализа Северо-Кавказского федерального университета (Акт о внедрении от 03.10.2014 г.). Программный комплекс зарегистрирован в Федеральной службе по интеллектуальной собственности и доступен другим пользователям.

Апробация работы. Результаты, полученные в рамках диссертационной работы, докладывались и обсуждались на конференциях и научных семинарах. Среди них - «Современные достижения в науке и образовании: математика и информатика» (г. Архангельск, 2010); «Ломоносов - 2011» (г. Москва, 2011); «Актуальные научные вопросы: реальность и перспективы» (г. Тамбов, 2012); «Моделирование и анализ информационных систем» (г. Ярославль, 2012); «Аналитические и численные методы моделирования естественнонаучных и социальных проблем» (г. Пенза, 2012); «Актуальные задачи математического моделирования и информационных технологий» (г. Сочи, 2013); «Наука и образование XXI века» (г. Уфа, 2014).

Публикации. Количество публикаций по теме диссертации составляет 21, из них 4 статьи в журналах, рекомендованных ВАК, 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ. К основным публикациям относятся 16 работ. Без соавторства опубликовано 11 научных работ. Общее число печатных листов публикаций – 6.55, из них на долю диссертанта приходится 4.47. Диссертант имеет индекс Хирша с учетом только статей в журналах, равный 1. Число цитирований статей диссертанта, опубликованных за последние 5 лет, составляет 3.

Структура и объем работы. Общий объем диссертации составляет 192 страницы, из них 160 страниц основного текста. Основная часть состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 95 наименований. Диссертация содержит 33 рисунка, 12 таблиц и 3 приложения общим объемом 32 страницы.

Основное содержание работы

Во **введении** приведена общая характеристика работы, дано обоснование актуальности темы диссертационной работы и соответствие результатов диссертации паспорту специальности 05.13.18, указаны основные задачи исследований, их научная и практическая значимость.

В первой главе выполняется обзор научной литературы по проблеме математического моделирования задач экологического мониторинга. Рассмотрены основные понятия экологического мониторинга, физические основы явления переноса загрязняющих примесей в турбулентной атмосфере и соответствующие математические модели. Выполнена постановка задачи моделирования нестационарного переноса примесей в пограничном слое атмосферы и определение исходных данных. Для уравнения диффузного переноса загрязняющих примесей с учетом в нем пространственно-временной изменчивости полей скорости ветра, турбулентной диффузии и источника рассмотрена первая краевая задача [1]:

$$\frac{\partial q(P,t)}{\partial t} + \alpha(t) \cdot q(P,t) + \left(\frac{\partial}{\partial x} (V_x(P,t) \cdot q(P,t)) + \frac{\partial}{\partial y} (V_y(P,t) \cdot q(P,t)) + \frac{\partial}{\partial z} (V_z(P,t) \cdot q(P,t)) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x(P,t) \cdot \frac{\partial q(P,t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y(P,t) \cdot \frac{\partial q(P,t)}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(P,t) \cdot \frac{\partial q(P,t)}{\partial z} \right) \right) = S(P,t), \quad (1)$$

$P = P(x, y, z)$, $P \in \Omega \subset R_3$, $t \in [0, T]$, начальные условия $q(P, 0) = q_0(P)$ для $P \in \Omega$, краевые условия: $q(P, t) = \bar{q}(P, t)$ для $P \in \bar{\Omega}$, $\bar{\Omega}$ - граница области Ω . В уравнении (1) $q(P, t)$ - концентрация примесей в точке P в момент времени t ; $\alpha(t)$ - коэффициент, характеризующий степень вывода или привнесения примесей в данный объем за счет химических или других процессов; $V_x(P, t)$, $V_y(P, t)$, $V_z(P, t)$ - компоненты вектора скорости ветра; $K_x(P, t)$, $K_y(P, t)$, $K_z(P, t)$ - турбулентность, характеризуемая коэффициентом турбулентной диффузии; перенос осуществляется вдоль координатных осей \vec{Ox} , \vec{Oy} , \vec{Oz} ; $S(P, t)$ - источник примесей. В общем случае $K(P, t)$ - тензорная величина, имеющая представление $K(P, t) = \{K_{i,k}(P, t)\}_{3 \times 3}$, где $K_{i,k}(P, t)$ определяет состояние турбулентности между i -ой и k -ой координатными осями. Если положить, что $K_{i,k}(P, t) = 0$ при $i \neq k$ и $K_{i,k}(P, t) \neq 0$ при $i = k$, то можно обозначить $K_{11} = K_{xx} = K_x$, $K_{22} = K_{yy} = K_y$, $K_{33} = K_{zz} = K_z$. С учетом того, что $\vec{V} = V_x \cdot \vec{i} + V_y \cdot \vec{j} + V_z \cdot \vec{k}$, уравнение (1) может быть записано в векторном виде: $\dot{q} + \alpha q + \text{div} \vec{J} = S$, $\vec{J} = \vec{V}q - \vec{K} \cdot \nabla q$, \vec{J} - вектор потока переносимой субстанции, \vec{K} - диада (тензор) с матрицей $\{K_{i,j}\}$, $i, j = 1, 2, 3$.

Важной проблемой при решении задачи (1) является её обеспечение исходными данными, а именно, требуется задать значения начальных и краевых условий $q(P, 0) = q_0(P)$, $q(P, t) = \bar{q}(P, t)$ для $P \in \bar{\Omega}$, компонент вектора скорости ветра $\{V_i(P, t)\}$, $i = 1, 2, 3$, матрицу значений турбулентной диффузии $\{K_{i,j}\}$, $i, j = 1, 2, 3$, источника примесей $S(P, t)$, а также требуется определить соответствующие производные модели (1). Для решения этой проблемы в работе рассмотрены следующие подходы. Во-первых, возможна оценка некоторых исходных данных на основе измерительной информации, полученной в ходе натурального эксперимента. В связи с этим проведен обзор соответствующих публикаций, из которых выбраны таблицы с данными мониторинга воздушного бассейна в пределах пограничного слоя, выполнен их анализ и установлены диапазоны изменения некоторых метеорологических параметров в зависимости от определенных состояний атмосферы, например стратификации и др. Во-вторых, для расчета начальных и краевых значений полей, входящих в (1), могут быть использованы полуэмпирические модели (или расчетные формулы), которые, в частности, можно найти в нормативном документе «Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий» [4]. Кроме того в работе представлены и другие полуэмпирические модели. Например, для оценки мгновенной концентрации загрязняющих примесей можно использовать аналитическое решение полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии с постоянными коэффициентами с мгно-

венным точечным источником, известное как гауссова функция распределения концентрации примесей [1]. Это решение позволяет задавать начальные и краевые условия в модели (1). Для оценки значений коэффициентов турбулентной диффузии в работе рассмотрена полуэмпирическая модель вида:

$$K = cL^2 \left[\left(\frac{\partial V_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_z}{\partial z} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (2)$$

$L=50-299$ м, $c=0.41$. Формула (2) предполагает горизонтальную однородность пограничного слоя, т.е. $V_y \approx V_x$ и $\frac{\partial V_y}{\partial x} \approx \frac{\partial V_x}{\partial x}$, $\frac{\partial V_y}{\partial z} \approx \frac{\partial V_x}{\partial z}$, ее обобщением может служить выражение:

$$K_i = L^2 \left(\sum_{j=1}^3 \eta_{ij} \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} \right)^2 \right)^{1/2}, \quad i=1,2,3, \quad (3)$$

где L - константа масштаба, $\{\eta_{ij}\}_{3 \times 3}$ - матрица весовых коэффициентов, характеризующая структуру турбулентных движений в пределах исследуемого объема. Выбор весовой матрицы $\{\eta_{ij}\}_{3 \times 3}$ осуществляется по результатам предварительных численных экспериментов, согласованных с типами турбулентных состояний пограничного слоя атмосферы. При этом в моделях (2)-(3) значения компонент вектора скорости ветра предполагаются известными [1].

Расчет значений компонент вектора скорости ветра может быть проведен на основе решения системы уравнений:

$$1). \text{ уравнение Навье-Стокса: } \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \vec{F}, \quad \vec{V} \cdot \nabla = V_x \frac{\partial}{\partial x} + V_y \frac{\partial}{\partial y} + V_z \frac{\partial}{\partial z}, \quad (4)$$

$$V_n = (\vec{V}, \vec{n}) = \varphi(\vec{P}, t), \quad \vec{P} \in \bar{\Omega}, \quad \vec{V}(P, t=0) = \vec{V}_0(P), \quad P \in \Omega, \quad \vec{n}(\vec{P}) - \text{нормаль к границе области } \Omega;$$

$$2). \text{ уравнение неразрывности: } \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) = 0, \quad (5)$$

$$3). \text{ уравнение состояния (Клайперона): } p = f(\rho, T), \quad p = f(\rho, T) = R \cdot \rho \cdot T. \quad (6)$$

Исходные данные для моделей (4)-(6): значение R - универсальной газовой постоянной; начальные условия $V_i(P, t=0)$, $i=1,2,3$, $\rho(P, t=0)$ - плотность газа, $p(P, t=0)$ - поле давления; краевые условия $V_i(P, t)$, $i=1,2,3$, $\rho(P, t)$, $p(P, t)$ для $P \in \bar{\Omega}$; распределения температуры $T(P, t)$, $F_i(P, t)$ - компоненты векторного силового поля; $P(x, y, z) \in \Omega$, $t \in [t_0, t_1]$. Для определения температурного поля $T(P, t)$ в пределах области Ω предварительно решается задача, основанная на решении уравнения притока тепла (п. 1.2 диссертации). В работе рассмотрены возможные модификации задачи (4)-(6) с учетом различных допущений, таких как $\vec{F} = \vec{F}(0, 0, g)$, или $\rho(P, t) = \text{const}$ в пределах области Ω и др., а также варианты (модификации) уравнения Навье-Стокса с учетом в них членов, определяемых турбулентным состоянием пограничного слоя атмосферы, например такие [1]:

$$1) \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \tilde{\Delta} \vec{V} + \vec{F}, \quad \text{где } \tilde{\Delta} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} K_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad (7)$$

$$2) \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + [\text{rot} \vec{V}, \vec{V}] - \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \vec{V} = \vec{F} - \frac{1}{\rho} \nabla \left(p + \frac{\rho}{2} \vec{V}^2 \right). \quad (8)$$

В уравнении (7) K_{ij} можно определить согласно (2) или (3). Уравнение (8) дополняется членом, учитывающим вязкость воздуха, ведущую к явлению турбулентного обмена, а именно, $(\mu/\rho) \nabla^2 \vec{V}$, в котором μ - динамический коэффициент вязкости.

В общем случае алгоритм решения задачи (1) может включать в себя следующие этапы (задачи): 1) выбор исходных данных в моделях (1), (2) или (3), а также в моделях (4)-(5)-(6) или (4)-(5)-(7) или (4)-(5)-(8) на основе данных мониторинга; 2) вычисление значений компонент вектора скорости ветра при соответствующих начальных и краевых условиях на основе модели (4)-(5)-(6) (может предваряться решением уравнения притока тепла для определения температурного поля); 3) оценка значений коэффициентов турбулентной диффузии – модель (2) или (3); 4) вычисление значений компонент вектора скорости ветра при соответствующих начальных и краевых условиях на основе модели (4)-(5)-(7) или (4)-(5)-(8) с учетом в них членов, определяемых турбулентным состоянием пограничного слоя атмосферы; 5) решение задачи (1) на основе уравнения переноса примесей в атмосфере. В работе [1] подробно излагаются соответствующие численные методы решения перечисленных задач, некоторые из них реализованы программно и сопровождаются вычислительными экспериментами. В завершение постановки задачи необходимо отметить, что данная система является открытой. Последовательность решения задач может быть другой. Совокупность рассмотренных задач представляет собой достаточно сложную многомерную систему, и ее реализация в полном объеме представляется достаточно затруднительной в вычислительном отношении. Можно для начала решать задачи по отдельности.

В пределах настоящей диссертации первая краевая задача (1) решается в рамках проблемы обеспечения математических моделей исходными данными, измеренных с погрешностями, что приводит к некорректности процедуры вычисления частных производных и, как следствие, к неустойчивости известных конечно-разностных численных методов и алгоритмов. Особенность такой постановки описана в разделе «актуальность» данного автореферата, при этом требуется построение соответствующих численных методов и устойчивых моделей к погрешностям в исходных данных, а также качественных, относительно простых, расчетно-аналитических моделей, в частности, для решения проблемы определения исходных данных. В диссертации делается акцент на разработке и численных исследованиях рекурсивно-итерационных методов и алгоритмов. Рекурсивная вычислительная схема для уравнения (1), представленного в операторной форме $\dot{q} + Dq = S$, D - дифференциальный оператор второго порядка по пространственным переменным задачи, и являющегося моделью эволюционного типа, имеет вид: $q^{j+1} = T^j q^j + \tau \cdot \hat{S}^j S^j$, $j = 0, 1, \dots$, $T^j = (I + (\tau/2) \cdot \Lambda^j)^{-1} (I - (\tau/2) \cdot \Lambda^j)$, $\hat{S}^j = (I + (\tau/2) \cdot \Lambda^j)$, T^j - оператор шага, \hat{S}^j - оператор источника, Λ^j - конечномерная аппроксимация оператора $D(t)$ на интервале $t_j \leq t \leq t_{j+1}$, $\tau = t_{j+1} - t_j$. В работе [1] получены соответствующие условия сходимости, в частности, неравенство $\|T^j\| < 1$ выступает как ограничение на оператор шага.

На примере одномерного уравнения переноса (1) в работе рассмотрено построение и обоснование параметризованной («качественной») модели. Алгоритм параметризации включает в себя процедуру нормирования всех переменных и распределений в (1) с целью их перемасштабирования и введение в модель параметров $\beta = (V^* T) / X$, $\theta = (K^* T) / X^2$, $\xi = (S^* T) / q^*$. Это позволяет решение (1) рассматривать как функцию параметров $\hat{q}(\hat{x}, \hat{t}, \alpha, \beta, \theta, \xi)$. Если при этом V^* и K^* , $V^* = \max_{P, t} \{V(P, t)\}$, $V_{\min} \leq V(P, t) \leq V_{\max}$ (аналогичные допущения касаются также K^* , S^* и q^*), определены однозначно, то параметры β и θ определяют X и T с помощью выражений $X = (K^* \cdot \beta) / (V^* \cdot \theta)$, $T = (K^* \cdot \beta^2) / ((V^*)^2 \cdot \theta)$. Параметры модели могут быть оптимизированы с помощью известных алгоритмов минимакса.

Для решения задачи (1) в параметризованном виде в главе приведен обзор двух численных методов. Первый метод основан на численном конечно-разностном алгоритме. Вторым методом, условно называемый в работе «методом интегральных уравнений», позволяет на основе интегральных представлений для решений краевых задач типа (1) получить соответствующие интегральные уравнения Вольтерра второго рода, и ввести в структуру вычислительных моделей итерационные алгоритмы на основе численного метода последовательных приближений, повысив тем самым их устойчивость и эффективность. В работе [1] доказано, что для операторов Вольтерра второго рода метод последовательных приближений сходится и получены условия сходимости (соответствующие оценки приведены в диссертации).

Во второй главе в первой её части разрабатывается и программно реализуется методика вычислительного эксперимента, которая включает в себя: выбор значений q_0 , V_0 , K_0 , α_0 , X и T в соответствии со спецификой конкретной прикладной задачи, масштабами и соответствующими диапазонами изменения этих констант, установленными на основе анализа табличных данных (некоторые из них приведены в Приложении 2 к диссертации); моделирование полей исходных данных с пространственно-временной распределенностью по алгоритмам тестовых задач; нормирование всех переменных и полей, входящих в уравнение переноса (1), оценка значений параметров модели α , β , θ и ξ , построение соответствующих им параметризованных моделей; получение приближенных решений по алгоритмам численных методов; численные исследования сходимости приближенного решения к точному; численное исследование устойчивости вычислительных методов к погрешностям в исходных данных; моделирование решений при различных исходных данных. Приводятся результаты численных исследований сходимости и устойчивости данных алгоритмов, выполняется анализ полученных результатов.

Во второй части главы развивается подход, согласно которому на основе итерационно-рекурсивного метода могут быть построены расчетно-аналитические качественные модели и соответствующие алгоритмы для оценки концентрации примесей. Основная цель при этом состоит в разработке методик качественной оценки значений параметров в задачах математического моделирования явления переноса в турбулентных средах. Это в свою очередь позволяет в какой-то мере решить проблему неопределенности некоторых исходных данных, кроме того позволяет получать простые аналитические решения исходной задачи, что упрощает задачу при построении алгоритмов. Полученные результаты моделирования можно использовать в других, более сложных вычислительных схемах, рассмотренных в первой главе, как некие предварительные исходные данные. В диссертации подробно излагаются этапы построения двух качественных расчетно-аналитических моделей, выполняется их алгоритмизация и программирование, реализуется предварительно разработанная методика вычислительного эксперимента применительно к этим моделям, получены результаты расчетов и численных исследований. Расчетные формулы первой вычислительной модели получены в виде:

$$\tilde{q}(\hat{x}|\hat{t}) = \lambda \int_0^{\hat{x}} \tilde{K}(\hat{x}, \hat{x}') \cdot \hat{q}(\hat{x}'|\hat{t}) d\hat{x}' + \varphi(\hat{x}|\hat{t}), \quad (9)$$

$$\tilde{K}(\hat{x}, \hat{x}') = e^{r_2(\hat{x}-\hat{x}')} - e^{r_1(\hat{x}-\hat{x}')}, \quad r_1 = \frac{\beta}{2\theta} + \sqrt{\frac{\beta^2}{4\theta^2} + \frac{\alpha}{\theta}}, \quad r_2 = \frac{\beta}{2\theta} - \sqrt{\frac{\beta^2}{4\theta^2} + \frac{\alpha}{\theta}}, \quad (10)$$

$$\varphi(\hat{x}|\hat{t}) = \tilde{q}(0|\hat{t}) - \lambda \cdot \xi \int_0^{\hat{x}} \tilde{K}(\hat{x}, \hat{x}') \cdot \hat{S}(\hat{x}'|\hat{t}) d\hat{x}', \quad \lambda = 1/\theta(r_2 - r_1), \quad \mu = \lambda \Delta \hat{x} / \Delta \hat{t}, \quad \eta = \lambda \cdot \xi \cdot \Delta \hat{x}. \quad (11)$$

Расчетные формулы второй вычислительной модели имеют следующее представление:

$$q(x,t) = \varphi(x,t) - \int_0^t \tilde{K}(t,t') \psi(x,t') dt', \quad \varphi(x,t) = q(x,0) \cdot e^{-\alpha t} + \int_0^t \xi \cdot e^{-\alpha(t-t')} \cdot S(x,t') dt', \quad (12)$$

$$\tilde{K}(t,t') = e^{-\alpha(t-t')}, \quad \psi(x,t,q',q'') = \beta V q'_x(x,t) - \theta K q''_{xx}(x,t) \quad (13)$$

Данный метод реализуется в виде следующей итерационной схемы:

$$q^{(\nu)}(t|x) = \varphi(t|x) - \int_0^t \tilde{K}(t,t') \cdot \psi(x,t',q^{(\nu-1)}(t'|x)) dt', \quad (14)$$

в которой x фиксировано и играет роль параметра, ν - номер итерации. Условие сходимости итерационного процесса задается так: если $\rho < \varepsilon$, где $\rho = \frac{1}{n \cdot (m-1)} \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n |q_{k,j}^{(\nu)} - q_{k,j}^{(\nu-1)}|$, $\tilde{q}_{k,j} = q_{k,j}^{(\nu)}$, в противном случае $\nu = \nu + 1$. Сравнение полученного приближенного решения \tilde{q} с точным q_T , которое генерируется в «Блоке исходных данных» с помощью тестовых примеров, и поэтому считается известным, выполняется по следующим формулам:

$$\sigma = \frac{1}{n \cdot (m-1)} \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n |(q_T)_{k,j} - \tilde{q}_{k,j}|, \quad \delta\tilde{q} = \frac{\sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n |(q_T)_{k,j} - \tilde{q}_{k,j}|}{\sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n |(q_T)_{k,j}|}, \quad (15)$$

величина $\delta\tilde{q}$ есть относительная погрешность метода.

Программная реализация расчетно-аналитических моделей осуществлялась при значениях исходных данных модели: $V_0 = 10$ м/с, $K_0 = 100$ м/с², $q_0 = 0.001$ кг/м³, $S_0 = 0.0001$ кг/м³·с, $\alpha = 0.1$, $\beta = 1$, $\theta = 1$, $m = 10$, $n = 100$, $\Delta x = 0.067$, $\Delta t = 0.05$, $\xi = 1.931$, $\lambda = 0.845$, $\mu = 1.127$, $\eta = 0.109$, $r_1 = -0.092$, $r_2 = 1.092$, $X = 10$ м, $T = 5$ с. На рисунках 1 и 2 показаны результаты расчетов для первой качественной расчетно-аналитической модели (9)-(11) в виде пространственно-временных распределений поля концентрации вредных примесей, соответствующих точному решению \hat{q}_T и приближенному решению \tilde{q} с погрешностью σ , определяемой выражением (15) и равной 0.08. Для второй качественной расчетно-аналитической модели (12)-(14) в работе построены аналогичные графические представления решений и при этом погрешность составила 0.02. На основе методики вычислительного эксперимента и соответствующего программного обеспечения, разработанных в первой части данной главы, выполняются численные исследования двух качественных моделей. В таблице 1 приведены результаты численного исследования устойчивости расчетно-аналитических качественных моделей к погрешностям в исходных данных. В работе выполнен анализ полученных результатов и сопоставление методов, что позволяет сделать вывод о вполне удовлетворительной работе данных качественных методов.

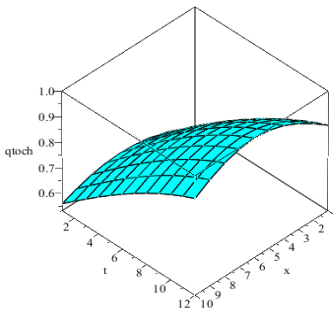


Рисунок 1 - Пространственно-временное распределение поля концентрации вредных примесей, соответствующих точному решению \hat{q}_T , полученному на основе тестового примера, разработанного для параметризованной модели одномерного уравнения переноса.

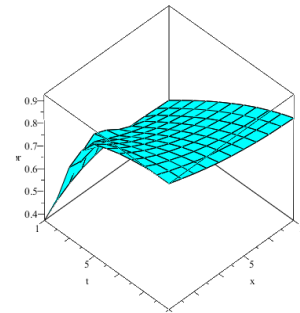


Рисунок 2 - Пространственно-временное распределение поля концентрации вредных примесей, соответствующих приближенному решению \tilde{q} , полученному с использованием рекурсивного алгоритма первой качественной модели одномерного уравнения переноса с погрешностью 0.08.

Таблица 1. Численные исследования сходимости и устойчивости расчетно-аналитических качественных моделей к погрешностям в исходных данных

ε	$\sigma_q^{(\delta)}$	$\overline{\delta S}$	$\overline{\delta q}$	η	η_1
для первой качественной расчетно-аналитической модели (9)-(11)					
0.010	0.014	0.006	0.0002	0.077	0.106
0.025	0.015	0.014	0.0004	0.193	0.264
0.050	0.015	0.028	0.0008	0.386	0.527
0.075	0.016	0.044	0.0012	0.578	0.789
0.100	0.018	0.057	0.0016	0.769	1.052
для второй качественной расчетно-аналитической модели (12)-(14)					
0.010	0.796	0.001	0.755	0.001	0.013
0.025	0.798	0.014	0.757	0.018	0.332
0.050	0.801	0.028	0.759	0.037	0.662
0.075	0.802	0.042	0.761	0.055	0.990
0.100	0.805	0.056	0.763	0.073	1.317

Примечание: ε - погрешность, вносимая в источник $S(x, t)$ - правую часть исходного уравнения (3), $\sigma_q^{(\delta)}$ - отклонение приближенного решения от точного, вычисляется согласно (15), $\overline{\delta S}$ - величина относительной погрешности функции источника $S(x, t)$, $\overline{\delta q}$ - величина относительной погрешности функции распределения $q(x, t)$, $\eta = \delta S / \delta q$ - коэффициент усиления погрешности, $\eta_1 = \overline{\delta S} / \overline{\delta q}$ - коэффициент усиления относительной погрешности.

Третья глава посвящена разработке вычислительных схем для пространственной задачи переноса и реализации на их основе вычислительного эксперимента по исследованию влияния различных значений скорости ветра, турбулентности и других характеристик состояния пограничного слоя атмосферы на пространственно-временное распределение поля концентрации загрязняющих примесей в атмосфере.

Первоначальным этапом является построение тестового примера для параметризованной модели пространственной задачи переноса, на основе которого в заключительной части главы выполняется тестирование алгоритмического и программного обеспечения. При построении тестового примера осуществлялся выбор исходных данных, выполнялась процедура нормирования всех переменных и распределений задачи, получена параметризованная модель пространственной задачи (1), проведена оценка значений параметров модели. Далее выполняется построение вычислительных алгоритмов на основе конечно-разностного и рекурсивно-итерационного методов, ранее разработанных и исследованных для одномерного параметризованного уравнения переноса во второй главе. Соответствующие одномерной задаче переноса вычислительные алгоритмы встраиваются в схему покоординатного расщепления исходного уравнения (1). Отличительной особенностью при этом является то, что трехмерное уравнение переноса (1) рассматривается совместно с уравнением неразрывности $div \vec{V} = 0$, что позволяет построить упрощенную модель по сравнению с (1). Для первой подзадачи в схеме расщепления конечно-разностный алгоритм на основе шеститочечной схемы построен в виде:

$$\begin{aligned} & \lambda_1 A_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) \cdot q_1(x_i, y_k, z_{l-1}, t_{j+1}) - (1 + \lambda_1 B_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1})) \cdot q_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) + \\ & + \lambda_1 C_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) \cdot q_1(x_i, y_k, z_{l+1}, t_{j+1}) = - \left(D_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) + q_1(x_i, y_k, z_l, t_j) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \lambda_1 c_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) \cdot (q_1(x_i, y_k, z_{l+1}, t_j) - 2q_1(x_i, y_k, z_l, t_j) + q_1(x_i, y_k, z_{l-1}, t_j)) \right), \\ & A_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) = 0.5 \cdot (b_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) \cdot \Delta z + c_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1})), \\ & B_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) = a_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) \cdot \Delta z^2 + 2c_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) &= -b_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) \cdot \Delta z + c_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}), \\
D_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) &= \xi_1 \cdot S_1(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) \cdot \Delta t, \quad a_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) = \alpha \cdot T, \\
b_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) &= \beta_z \cdot V_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) - \theta_z \cdot (K_z(x_i, y_k, z_{l+1}, t_{j+1}) - K_z(x_i, y_k, z_{l-1}, t_{j+1})) / 2\Delta z, \\
c_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}) &= \theta_z \cdot K_z(x_i, y_k, z_l, t_{j+1}), \quad \lambda_1 = \Delta t / \Delta z^2, \quad i = \overline{0, M}, \quad k = \overline{0, K}, \quad l = \overline{1, L-1}, \quad j = \overline{0, N-1}, \\
q_1(x_i, y_k, z_l, 0) &= q_0(x_i, y_k, z_l), \quad \text{если } j = 0, \quad i = \overline{0, M}, \quad k = \overline{0, K}, \quad l = \overline{0, L}, \\
q_1(x_i, y_k, z_l, t_j) &= q_3(x_i, y_k, z_l, t_j), \quad \text{если } j > 0, \quad i = \overline{0, M}, \quad k = \overline{0, K}, \quad l = \overline{0, L}, \\
q_1(x_i, y_k, z_0, t_{j+1}) &= \bar{q}_4(x_i, y_k, 0, t_{j+1}), \quad q_1(x_i, y_k, z_L, t_{j+1}) = \bar{q}_5(x_i, y_k, 1, t_{j+1}), \quad i = \overline{0, M}, \quad k = \overline{0, K}.
\end{aligned}$$

Ниже приводится фрагмент рекурсивно-итерационного алгоритма для первой подзадачи в схеме расщепления:

$$\begin{aligned}
t_j \leq t' \leq t \leq t_{j+1}, \quad q_1(P_1, t) &= \varphi_1(P_1, t) - \int_{t_j}^t \tilde{K}(t, t') \psi_1(P_1, t') dt', \quad \tilde{K}(t, t') = \exp\{-\alpha(t-t')\}, \quad \alpha = \alpha \cdot T, \\
\psi_1(P_1, t') &= \left(\beta_z V_z(P_1, t') - \theta_z \frac{\partial K_z(P_1, t')}{\partial z} \right) \cdot \frac{\partial q_1(P_1, t')}{\partial z} - \theta_z K_z(P_1, t') \frac{\partial^2 q_1(P_1, t')}{\partial z^2}, \\
\varphi_1(P_1, t) &= q_1(P_1, t_j) \cdot \exp\{-\alpha(t_j - t)\} + \xi_1 \int_{t_j}^t S_1(P_1, t') \tilde{K}(t, t') dt', \\
q_1(P_1, t_j) &= q_0(P_1), \quad \text{если } j = 0, \quad q_1(P_1, t_j) = q_3(P_1, t_{j+1}), \quad \text{если } j > 0, \\
P &= P(x, y, z), \quad P_1 = P(z|x, y), \quad q_1(z_0|x, y, t) = \bar{q}_4(x, y, t), \quad q_1(z_L|x, y, t) = \bar{q}_5(x, y, t).
\end{aligned}$$

Для остальных подзадач соответствующие алгоритмы строятся аналогично.

На основе разработанного программного обеспечения выполнена постановка и проведен вычислительный эксперимент по исследованию влияния различных значений скорости ветра, турбулентности и других характеристик состояния пограничного слоя атмосферы на пространственно-временное распределение поля концентрации загрязняющих примесей. Так, для различных значений скорости ветра, коэффициента турбулентной диффузии, типа облачности, вида загрязняющей примеси, характеризующих различные состояния пограничного слоя атмосферы (Приложение 2), построены пространственно – временные распределения концентрации примесей (рис. 3, 4).

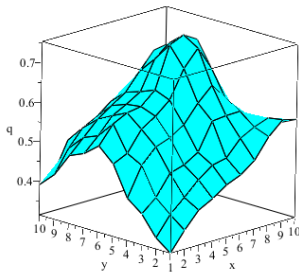


Рисунок 3 – Распределение поля концентрации загрязняющих примесей $\bar{q}(P, t)$, компонент поля скорости ветра $V_{x,0} = 10.8$ м/с, $V_{y,0} = 10.8$ м/с, $V_{z,0} = 10.8$ м/с, компонент поля турбулентной диффузии $K_{x,0} = 40$ м²/с, $K_{y,0} = 40$ м²/с, $K_{z,0} = 4$ м²/с, что соответствует условиям состояния атмосферы: нейтральная стратификация, высота источника $Z = 100$ м, тяжелая примесь, тип облачности – слоисто – дождевая облачность среднего яруса (Ns-As-Ac)

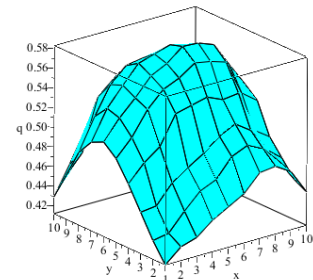


Рисунок 4 – Распределение поля концентрации загрязняющих примесей $\bar{q}(P, t)$, компонент поля скорости ветра $V_{x,0} = 13.7$ м/с, $V_{y,0} = 13.7$ м/с, $V_{z,0} = 13.7$ м/с, компонент поля турбулентной диффузии $K_{x,0} = 50$ м²/с, $K_{y,0} = 50$ м²/с, $K_{z,0} = 5$ м²/с, что соответствует условиям состояния атмосферы: устойчивая стратификация, высота источника $Z = 500$ м, средняя примесь, тип облачности – слоисто – дождевая облачность среднего яруса (Ns-As-Ac)

В таблице 2 представлены результаты вычислений минимального и максимального значений поля концентрации загрязняющих веществ, среднее значение в его пределах при различных значениях поля скорости ветра, коэффициента турбулентной диффузии и типа облачности атмосферы. В работе проводится анализ полученных результатов. Результаты расчетов согласуются с результатами натурных измерений, опубликованных в соответствующих научных работах, например в [3].

Таблица 2. Результаты вычислений значений концентрации загрязняющих веществ при различных значениях состояния атмосферы в пределах ее пограничного слоя

X (м)	Y (м)	Z (м)	T (с)	V (м/с)	K ($\text{м}^2/\text{с}$)	α (с^{-1})	Тип облачности	$[q_{\min}, q_{\max}]$ ($\text{кг}/\text{м}^3$)	q_{cp} ($\text{кг}/\text{м}^3$)
642	642	100	60	10.7	150	0.013	CU-Cong	[0.309, 0.661]	0.485
648	648	200	60	10.8	40	0.013	Ns-As-Ac	[0.314, 0.754]	0.534
1200	1200	500	90	13.7	50	0.003	Ns-As-Ac	[0.412, 0.583]	0.498
980	980	500	60	16.4	100	0.013	Ns-As-Cb	[0.391, 0.641]	0.516
972	972	200	60	13.5	150	0.00013	Cb	[0.366, 0.674]	0.520
810	810	500	60	16.4	250	0.003	Ns-As-Cb	[0.387, 0.521]	0.454

Примечание: X (м), Y (м), Z (м) (высота) - пространственные переменные, T (с) - временная переменная, V (м/с) - скорость ветра, K ($\text{м}^2/\text{с}$) - коэффициент турбулентной диффузии, q_{cp} ($\text{кг}/\text{м}^3$) - среднее значение загрязняющей примеси, **Тип облачности:** Мощно-кучевая CU-Cong, Слоисто-дождевая среднего яруса Ns-As-Ac, Слоисто-дождевая Ns-As, Кучево-дождевая Cb, Слоистокучевая-дождевая Ns-As-Cb; **Тип примеси:** 0.013 (с^{-1}) - тяжелая, 0.003 (с^{-1}) - средняя, 0.00013 (с^{-1}) - легкая.

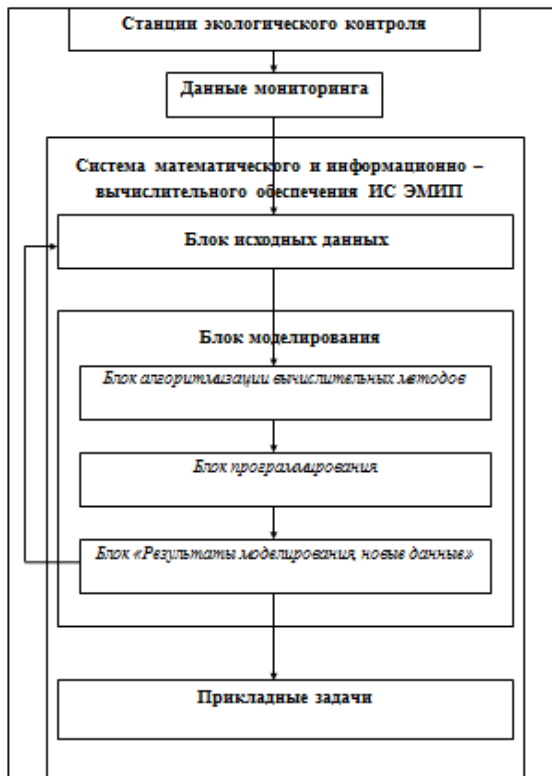


Рисунок 5 – Структурная схема системы компьютерного моделирования процессов переноса загрязняющих примесей в атмосфере

Четвертая глава посвящена разработке системы компьютерного моделирования пространственно-временной изменчивости поля концентрации загрязнений в атмосфере на основе разработанных в предыдущих главах численных методов и программного обеспечения. Предложена концепция информационно-вычислительного обеспечения задач экологического прогноза состояния воздушной среды (рис. 5), в соответствии с чем разработана данная система компьютерного моделирования, которая в свою очередь может быть включена как подсистема в состав системы «автоматизированное место специалиста-эколога», функционирующей, например, на станциях экологического контроля вблизи промышленных предприятий. Система компьютерного моделирования есть комплекс взаимосвязанных алгоритмов, представленных в диссертации с помощью «псевдо-языка программирования» [1] и системы драйверных модулей, а соответствующие этим алгоритмам программы размещены в приложении 3 к диссер-

тации. Программные комплексы зарегистрированы в Федеральной службе по интеллектуальной собственности (Тип ЭВМ: IBM PC-совместимые ПК, Язык: Maple 14, ОС: Windows 7 Корпоративная; Объем программ: № 2013614085 – 223 Кб, № 2014661580 – 488 Кб).

Основные результаты, полученные в диссертации:

1. Для параметризованного уравнения переноса загрязняющих примесей в атмосфере построены две качественные расчетно-аналитические модели оценки концентрации примесей, первая на основе фундаментальной системы решений однородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами; вторая – на основе представления искомого решения интегральным уравнением Вольтерра второго рода и метода последовательных приближений. Это позволяет выполнять качественную оценку значений параметров в задачах математического моделирования явления переноса в турбулентных средах. Построены итерационно-рекурсивные алгоритмы для первой и второй качественных расчетно-аналитических моделей соответственно;

2. Разработана и программно реализована методика проведения вычислительного эксперимента, на основе которой в работе проведены численные исследования расчетно-аналитических моделей;

3. На основе численного метода покоординатного расщепления трехмерного параметризованного уравнения переноса и итерационно-рекурсивных методов и алгоритмов, разработанных первоначально для одномерной задачи, выполнено построение вычислительных алгоритмов для решения пространственной задачи переноса;

4. Проведен вычислительный эксперимент по исследованию свойств рекурсивно-итерационных алгоритмов решения одномерной задачи переноса, а именно сходимости и устойчивости к погрешностям в исходных данных; по исследованию влияния различных значений скорости ветра, турбулентности и других характеристик состояния пограничного слоя атмосферы на пространственно-временное распределение поля концентрации загрязняющих примесей на примере решения пространственной задачи переноса;

5. Предложена концептуальная схема информационно-вычислительного обеспечения задач переноса загрязняющих примесей в атмосфере и на ее основе разработана программно-алгоритмическая система компьютерного моделирования.

Основные результаты диссертации отражены в следующих, наиболее значимых публикациях (полный список публикаций приведен в диссертации):

Работы, опубликованные в изданиях из перечня ВАК:

1. Наац, В.И. Численное исследование рекурсивных и итерационных алгоритмов в задаче моделирования переноса аэрозолей в атмосфере / В.И. Наац, **Е.П. Ярцева** // Вестник Ставропольского государственного университета. – 2011. – Выпуск 75 [4]. – С. 44 – 50.

2. Наац, В.И. Качественная модель оценки концентрации аэрозольных примесей в атмосфере, основанная на интегральном представлении решения уравнения турбулентной диффузии / В.И. Наац, **Е.П. Ярцева** // Известия высших учебных заведений. Северо – Кавказский регион. Естественные науки. – 2012. – № 1. – С. 38 – 43.

3. Наац, В.И. Разработка качественной модели и итерационного алгоритма для оценки концентрации загрязняющих примесей в атмосфере / В.И. Наац, **Е.П. Ярцева** // Вестник Северо – Кавказского федерального университета. – 2013. – № 1 (34). – С. 15 – 21.

4. Наац, В.И. Построение рекурсивно-итерационного алгоритма для трехмерного нестационарного уравнения переноса примесей в атмосфере / В.И. Наац, **Е.П. Ярцева** // Вестник Северо – Кавказского федерального университета. – 2014. – № 2 (41). – С. 9 – 14.

Свидетельства о регистрации программ:

5. **Ярцева Е.П.** Качественные модели и вычислительные алгоритмы оценки концентрации загрязняющих примесей в турбулентной атмосфере. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013614085. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 23 апреля 2013.

6. **Ярцева Е.П.** Программа для реализации рекурсивных и итерационных вычислительных алгоритмов для пространственной задачи переноса загрязняющих примесей в турбулентной атмосфере. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014661580. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 31 октября 2014.

Список цитированной литературы:

1. **Наац, В.И.** Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы / В.И. Наац, И.Э. Наац. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 328 с.

2. **Марчук, Г.И.** Математическое моделирование в проблеме охраны окружающей среды / Г.И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 320 с.

3. **Израэль, Ю.А.** Экология и контроль состояния природной среды / Ю.А. Израэль. – М.: Гидрометеиздат, 1984. – 560 с.

4. **Методика** расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий: Госкомгидромет: ОНД-56 / под ред. Н.К. Берлянда и др. – Ленинград: Гидрометеиздат. – 1987. – 93 с.