

УДК 519.6

## Численная модель трансформации биоаэрозолей в атмосфере

А.В. Пененко<sup>1,2</sup>, А.А. Сороковой<sup>1,2</sup>, К.Е. Сороковая<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup> *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН*

*630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6*

<sup>2</sup> *Новосибирский государственный университет*

*630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2*

Поступила в редакцию 22.01.2016 г.

Рассматривается нестационарная математическая модель динамики биоаэрозольной популяции, основанная на нелинейных интегро-дифференциальных уравнениях, описывающих процессы коагуляции, конденсации и испарения в зависимости от размеров частиц. Представлена безусловно положительная численная схема для решения задачи трансформации аэрозолей в атмосфере. Рассматриваемая модель была численно сопоставлена с моделями, описывающими отдельные механизмы в ее составе. На основе численных экспериментов исследован относительный вклад каждого из механизмов в общую динамику аэрозольных популяций.

*Ключевые слова:* математическое моделирование, аэрозольные популяции, трансформация примесей, коагуляция, интегро-дифференциальные уравнения; mathematical modeling, aerosol populations, impurities transformation, coagulation, integral-differential equations.

### Введение

Настоящая статья продолжает цикл исследований по разработке численных моделей для решения задач охраны окружающей среды. Математические модели являются важнейшими инструментами современных естественных наук, так как позволяют связать наблюдаемые и ненаблюдаемые переменные. Это свойство дает возможность формулировать с их помощью обратные задачи, когда требуется найти такие параметры моделей, при которых результаты моделирования соответствуют измерениям. Зачастую алгоритмы решения обратных задач требуют многочисленных решений прямых задач, а алгоритмы усвоения данных — многочисленных решений обратных. Следовательно, вопросы эффективности вычислений становятся существенными. В данной статье предметом исследования являются численные модели динамики аэрозолей, в которых мы применяем дискретно-аналитические схемы, предложенные в [1–3]. Они имеют ряд преимуществ в части описания разномасштабных механизмов. Используемые в настоящее время для моделирования динамики аэрозолей в атмосфере численные методы и детальный обзор литературы в этом направлении исследований представлены в [4]. Основные процессы, которые учитываются в моделях аэрозольной динамики, — это коагуляция, конвекция — диффузия, конденсация и испарение и др.

Для моделирования механизмов коагуляции используются различные варианты уравнения Смолуховского. Это уравнение нашло применение при описании изменчивостей различной природы, например, эволюции аэрозольных составов [5], микрофизики облаков и осадков [6], роста бактерий [7], изменения размеров особей стайных рыб [8] и др. Теоретические вопросы существования, устойчивости, а также изучение свойств их решений можно найти в [9]. В настоящее время известно всего несколько аналитических решений этого уравнения и лишь для определенных случаев. Поэтому были разработаны разнообразные численные методы решения уравнения Смолуховского, такие как метод конечных элементов [10]; конечно-разностные методы, основанные на специальных представлениях ядер коагуляции [11, 12]; метод конечных объемов [13, 14]; метод последовательных приближений [15]; метод моментов [16, 17]; методы Монте-Карло [18–20]; бессеточный подход на базе радиальных функций [21] и др. Сравнение численных методов подробно приводится в работе [22]. В данной статье мы используем оригинальные дискретно-аналитические схемы, построенные с применением концепции сопряженных интегрирующих множителей [1, 2]. Основное преимущество этих схем — их вычислительная эффективность и безусловная монотонность для реализации моделей аэрозольных популяций в пространствах размеров частиц. Подчеркнем, что на всех этапах вычислений необходимо сохранять неотрицательность функций состояния исследуемых объектов. По существу речь идет о развитии комплекса алгоритмов для изучения внутренней дина-

\* Алексей Владимирович Пененко (a.penenko@yandex.ru); Алексей Александрович Сороковой (AASorokovoy@mail.ru); Ксения Евгеньевна Сороковая (ksushakz@yandex.kz).

мики трансформации аэрозолей. Эти алгоритмы предназначены для использования в параллельном режиме в соответствии со структурой системы конечных объемов в четырехмерных моделях типа конвекции–диффузии–реакции многокомпонентных газоаэрозольных субстанций в атмосфере.

## Постановка задачи

Рассматривается задача трансформации аэрозольных примесей в атмосфере в зависимости от размеров частиц с учетом процессов коагуляции, испарения (конденсации) и диффузии. В качестве количественной характеристики размеров частиц произвольной конфигурации обычно используют их массу, объем или радиус эквивалентной по объему сферы. Структуру основного интегро-дифференциального оператора модели определим, следуя [4, 23–25], в пространственно-временной области  $D_t = D[0; T_{\max}]$ , где  $D = [r_{\min}, r_{\max}]$  – диапазон размеров частиц, а  $T_{\max}$  – длина временного интервала. Модель задается начально-краевой задачей

$$\begin{aligned} & \frac{\partial c(r, t)}{\partial t} + (\alpha_D(r) + \alpha_S(r))c(r, t) - \\ & - \frac{1}{2} \int_0^r K(q(r, r'), r')c(q(r, r'), t)c(r', t)w(r, r')dr' + \\ & + c(r, t) \int_0^{r_{\max}} K(r, r')c(r', t)dr' + \frac{\partial}{\partial r}(U(r)c(r, t)) - \\ & - \frac{\partial^2}{\partial r^2}(U_D(r)c(r, t)) = 0, \quad (r, t) \in D_t, \\ & q(r, r') = (r^3 - r'^3)^{\frac{1}{3}}, \quad w(r, r') = r^2 / q(r, r')^2, \\ & c(r_{\min}, t) = 0, \quad c(r_{\max}, t) = 0, \quad c(r, 0) = c_0(r). \quad (1) \end{aligned}$$

Для конкретизации рассмотрим динамику биологически активных субстанций. Обозначения и физическое содержание основных объектов в составе задачи (1) возьмем из [23–25]:  $c(r, t) \in Z(D_t)$  – концентрация взвешенных в воздухе частиц, размер которых лежит в интервале  $[r, r + dr]$ ,  $Z(D_t)$  – пространство достаточно гладких функций, в которых разыскивается решение задачи;  $K(r_i, r_k)$  – ядро, описывающее процессы коагуляции частиц и определенное для любых  $r_i, r_k \in D$ :

$$\begin{aligned} K(r_i, r_k) &= K_g(r_i, r_k) + K_B(r_i, r_k), \\ K_g(r_i, r_k) &= \pi \varepsilon (r_i + r_k)^2 [U_S(r_i) - U_S(r_k)], \\ K_B(r_i, r_k) &= 4\pi k T (r_i + r_k)(B(r_i) + B(r_k)). \end{aligned}$$

Здесь  $K_g(r_i, r_k)$  – гравитационная коагуляция,  $K_B(r_i, r_k)$  – броуновская коагуляция;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура;

$$\begin{aligned} \alpha_D(r) &= kTB(r)A_D / (\delta_D V), \\ \alpha_S(r) &= [(4/3)\pi r^3 g B(r)A_H] / V, \end{aligned}$$

$A_D, A_H$  – параметры, учитывающие вертикальное и горизонтальное осаждение частиц на поверхностях,  $\alpha_D, \alpha_S$  – скорости удаления частиц,  $V$  – объем локализации аэрозолей,  $\rho$  – плотность частиц,  $g$  – ускорение свободного падения,  $\delta_D$  – толщина пограничного слоя,  $B(r) = Cn(r)/(6\pi\eta r)$  – мобильность частиц радиуса  $r$ ,  $\eta$  – вязкость газа;

$$Cn(r) = 1 + 1,246K_n(r) + 0,42K_n(r)\exp(-0,87/K_n(r))$$

– эмпирический корректирующий коэффициент Каннингема;  $K_n(r) = l/r$  – число Кнудсена,  $l$  – длина свободного пробега молекул;

$$\varepsilon = 0,5(r_i / (r_i + r_k))^2$$

– эффективность столкновения частиц;

$$U_S(r) = 2\rho_{\text{eff}}gr^2Cn(r) / (9\eta)$$

– скорость гравитационного осаждения частиц (закон Стокса),  $\rho_{\text{eff}}$  – эффективная плотность сферической частицы;

$$U(r) = \frac{4D_iM_i}{2RT\rho_{\text{eff}}}(P_i - P_{\text{eq},i})Cn(r)$$

– скорость конденсационного роста частиц,

$$P_i - P_{\text{eq},i} = \Delta P$$

– параметр, определяющий физический смысл процесса: при  $\Delta P > 0$  происходит конденсация, при  $\Delta P < 0$  – испарение;  $D_i$  – диффузионный коэффициент;  $M_i$  – молярный вес;  $R$  – газовая постоянная;  $U_D(r) = |U(r)|\Delta r/2$  – скорость диффузии.

## Численные схемы

Рассмотрим исходную задачу (1) на временном интервале  $t_j \leq t \leq t_{j+1}$ . На каждом таком шаге применяем метод расщепления по физическим процессам [26]. В результате получим две взаимосвязанные подзадачи:

$$\frac{\partial c_1(r, t)}{\partial t} + A(c_1, r, t)c_1(r, t) = F(c_1, r, t),$$

$$A(c_1, r, t) = (\alpha_D(r) + \alpha_S(r))c_1(r, t) +$$

$$+ \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} K(r, r')c_1(r', t)dr',$$

$$\begin{aligned} F(c_1, r, t) &= \frac{1}{2} \int_{r_{\min}}^r K((r^3 - r'^3)^{\frac{1}{3}}, r')c_1((r^3 - r'^3)^{\frac{1}{3}}, t) \times \\ & \times c_1(r, t) \frac{r^2}{(r^3 - r'^3)^{\frac{2}{3}}} dr', \end{aligned}$$

$$c_1(r, t_j) = c(r, t_j), \quad c_1(r_{\min}, t) = 0, \quad c_1(r_{\max}, t) = 0,$$

$$c_1(r, 0) = c_0(r), \quad (r, t) \in (r_{\min}, r_{\max}) \times (t_j, t_{j+1}) \equiv D_t^j \in D_t; \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(U(r)c_2(r, t)) - \frac{\partial^2}{\partial r^2}(U_D(r)c_2(r, t)) &= 0, \\ c_2(r, t_j) &= c_1(r, t_{j+1}), \quad c(r, t_{j+1}) = c_2(r, t_{j+1}), \\ c_2(r_{\min}, t) &= 0, \quad c_2(r_{\max}, t) = 0, \quad (r, t) \in D_t^j. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь соотношения (2) представляют собой задачи Коши–Смолуховского для описания процессов коагуляции аэрозолей в подобластях  $D_t^j \in D_t$ . Соответственно, уравнения (3) описывают начально-краевые задачи для процессов конденсации/испарения, диффузии и осаждения аэрозольных субстанций.

Чтобы построить численные схемы для процессов коагуляции аэрозолей, используем вариационный подход, предложенный в [1, 2]. В результате его применения получим дискретно-аналитическую схему:

$$\begin{aligned} c_1(r_k, t_{j+1}) &= c_1(r_k, t_j) e^{-\bar{A}(c_1, r_k, t_j)\Delta t} + \\ &+ \frac{1 - e^{-\bar{A}(c_1, r_k, t_j)\Delta t}}{\bar{A}(c_1, r_k, t_j)\Delta t} \bar{F}(c_1, r_k, t_j)\Delta t, \quad k = \overline{1, N_0}, \\ \bar{A}(c, r_k, t) &= (\alpha_D(r_k) + \alpha_S(r_k))c(r_k, t) + \\ &+ \sum_{i=0}^{N_0-1} \frac{K(r_k, r_i)c(r_i, t) + K(r_k, r_{i+1})c(r_{i+1}, t)}{2} \Delta r_{i+0,5}, \\ \bar{F}(c, r_k, t) &= \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{k-1} \{K(\bar{q}(r_k, r_i), r_i)c(\bar{q}(r_k, r_i), t)c(r_i, t)w(r_k, r_i) + \\ &+ K(\bar{q}(r_k, r_{i+1}), r_{i+1})c(\bar{q}(r_k, r_{i+1}), t)c(r_{i+1}, t)w(r_k, r_{i+1})\} \Delta r_{i+0,5}, \\ \bar{q}(r_k, r_i) &= \operatorname{Argmin}_{r \in \omega_r^k} |q(r_k, r_i) - r|, \quad \Delta r_{i+0,5} = r_{i+1} - r_i. \end{aligned} \quad (4)$$

Шаг  $\Delta t$  выбираем из условия  $|\bar{A}(c_1, r_k, t_j)\Delta t| \leq 10$ .

Для получения разностной схемы для процессов конвекции – диффузии (3) используем формулы направленных разностей

$$\begin{aligned} &\frac{c_2(r_k, t_{j+1}) - c_2(r_k, t_j)}{\Delta t} + \\ &+ \frac{U^+(r_k)c_2(r_k, t_{j+1}) - U^+(r_{k-1})c_2(r_{k-1}, t_{j+1})}{\Delta r_{k-0,5}} + \\ &+ \frac{U^-(r_k)c_2(r_k, t_{j+1}) - U^-(r_{k+1})c_2(r_{k+1}, t_{j+1})}{\Delta r_{k+0,5}} - \\ &- \frac{1}{\delta r_k} \left( \frac{U_D(r_{k+1})c_2(r_{k+1}, t_{j+1}) - U_D(r_k)c_2(r_k, t_{j+1})}{\Delta r_{k+0,5}} - \right. \\ &\left. - \frac{U_D(r_k)c_2(r_k, t_{j+1}) - U_D(r_{k-1})c_2(r_{k-1}, t_{j+1})}{\Delta r_{k-0,5}} \right) = 0, \\ U^+(r) &= (|U(r)| + U(r))/2, \\ U^-(r) &= (|U(r)| - U(r))/2, \quad \delta r_k = \frac{1}{2}(\Delta r_{i+0,5} + \Delta r_{i-0,5}). \end{aligned} \quad (5)$$

В результате решения получим значение концентрации  $c(r, t_{j+1})$  на  $j + 1$ -м шаге. Полученную систему уравнений решаем методом трехточечной прогонки. Заметим, что здесь приведены упрощенные версии численных схем (4), (5), экономичные в реализации и обладающие свойствами аппроксимации, устойчивости и безусловной монотонности. Более точные дискретно-аналитические схемы приведены в работах [1, 2].

## Численное моделирование динамики биоаэрозолей

Алгоритм, основу которого составляет дискретно-аналитические схемы (4), (5), был реализован на языке С++ [27]. Изучим, как изменится динамика решения по модели из [24], описанной на соответствующей стадии расщепления соотношениями (2), при добавлении процессов конденсации (согласно [23]), составляющих стадию расщепления (3). Для этого сравним решения по модели (2) с результатами модели, учитывающей только процессы конденсации (3), и общей численной модели (1). Решения будем получать со следующими параметрами модели процессов [24] и сеточных областей:

$$\begin{aligned} \eta &= 1,82 \cdot 10^{-8} \text{ Па} \cdot \text{с}, \quad \rho_{eff} = 10^3 \text{ кг/м}^3, \quad A_D = 200 \text{ м}^2, \\ \delta_D &= 0,0001 \text{ м}, \quad A_H = 600 \text{ м}^2, \quad U_S = 0,00002 \text{ м/с}, \\ l &= 6,53 \cdot 10^{-8} \text{ м}, \quad T = 298 \text{ К}, \quad V = 2000 \text{ м}^3, \\ D_i &= 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}, \quad M_i = 0,1 \text{ кг/моль}, \\ P_i - P_{eq,i} &= 10^{-4} \text{ Па}, \quad R = 8,31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}, \\ N_0 &= 200, \quad r_{\min} = 0, \quad r_{\max} = 10 \cdot 10^{-6} \text{ м}, \\ \Delta t &= 300 \text{ с}, \quad T_{\max} = 50 \cdot 3600 \text{ с}. \end{aligned}$$

Начальное распределение концентрации представлено на рис. 1. Это гауссова кривая с центром  $0,59 \cdot 10^{-6}$  м, стандартным отклонением  $0,25 \cdot 10^{-6}$  м и с множителем, обеспечивающим максимум распределения  $c(r, 0)dr$ , равным  $8 \cdot 10^6$  частиц/м<sup>3</sup>.

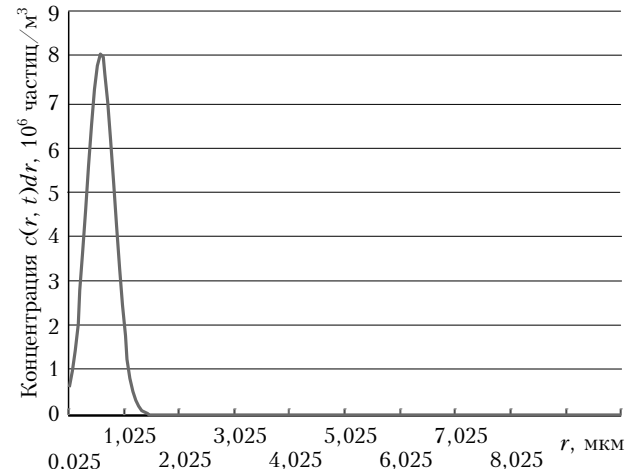


Рис. 1. Начальное распределение частиц по радиусам

На рис. 2 представлено сравнение решений по моделям (2), (3) и (1). Из возникающих особенностей можно отметить, что максимумы концентраций, вычисленных по моделям (1) и (3), находятся во внутренних точках пространственно-временной области, что согласуется с результатами из [23] относительно свойств процессов конденсации.

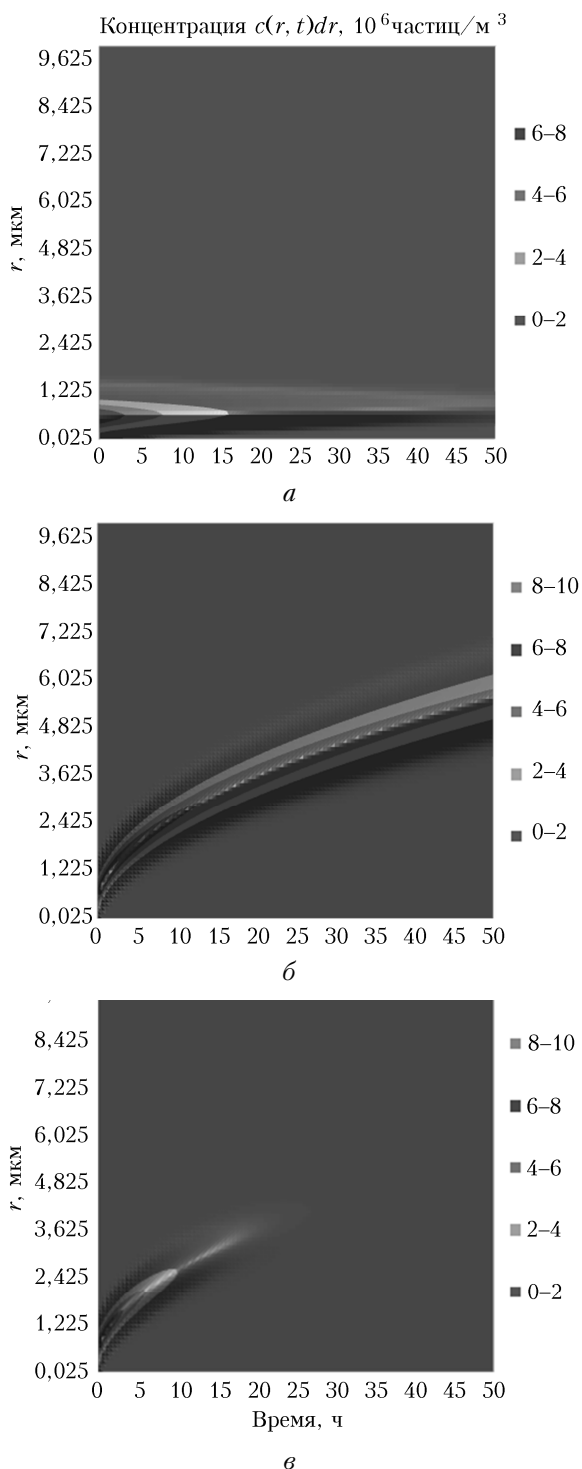


Рис. 2. Решения: *a* – по модели (2); *б* – по модели (3); *в* – по модели (1)

Кроме того, концентрация в модели коагуляции–осаждения–конденсации на рис. 2, *в* убывает быстрее, чем в модели коагуляции–осаждения на рис. 2, *а*.

Совместное рассмотрение процессов коагуляции и процессов конденсации/испарения модифицирует динамику распределений частиц в пространстве их радиусов. В проведенных численных экспериментах можно отметить постепенное смещение начальной моды спектра частиц в сторону больших радиусов, тогда как в модели коагуляции–осаждения начальная мода остается на месте. Кроме того, в численных экспериментах было получено, что концентрация в присутствии процессов конденсации/испарения убывает быстрее, что важно при изучении процессов биоаэрозольного загрязнения.

### Заключение

Приведены новые версии численных моделей динамики аэрозолей. Для решения задачи использован метод расщепления по физическим процессам: коагуляции и испарения (конденсации) – диффузии в пространстве радиусов. Это позволило рассмотреть все механизмы по отдельности и оценить роль каждого в общей задаче. Для шага расщепления, соответствующего процессам коагуляции, построена дискретно-аналитическая явная схема. Достоинством явных схем является возможность эффективного распараллеливания, что также важно для организации эффективных вычислений. Благодаря экспоненциальному характеру схема обеспечивает неотрицательность и устойчивость решения при неотрицательных начальных данных и, в отличие от классических явных схем Эйлера, не требует для этого дробления временного шага.

Приведено численное сравнение рассмотренной модели с моделями, учитывающими только процессы коагуляции или только процессы испарения (конденсации) – диффузии. В численных экспериментах была получена более высокая скорость убывания концентраций при участии процессов конденсации/испарения, что важно при изучении процессов биоаэрозольного загрязнения атмосферы и особенно при изучении качества воздуха в закрытых помещениях.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33П и проектов РФФИ № 14-01-00125-а и МК-8214.2016.1.

1. Penenko V.V., Tsvetova E.A., Penenko A.V. Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies // Comput. Math. Appl. 2014. V. 67, N 12. P. 2240–2256.
2. Пененко В.В., Цветова Е.А. Вариационные методы построения монотонных аппроксимаций для моделей химии атмосферы // Сиб. журн. вычисл. матем. 2013. Т. 16, № 3. С. 243–256.
3. Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеониздат, 1981. 352 с.

4. *Алоян А.Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: Наука, 2008. 415 с.
5. *Drake R.L.* A General mathematical survey of the coagulation equation // *Topics in Current Aerosol Research (Part 2)*. New York: Pergamon Press, 1972. P. 201–376.
6. *Pruppacher H.R., Klett J.D.* Microphysics of clouds and precipitation. Boston: Riedel, 1980. 954 p.
7. *Bortz D.M., Jackson T.L., Taylor K.A., Thompson A.P., Younger J.G.* Klebsiella pneumoniae flocculation dynamics // *Bull. Math. Biol.* 2008. V. 70, N 3. P. 745–768.
8. *Niwa H.S.* School size statistics of fish // *J. Theor. Biol.* 1988. V. 195, N 3. P. 351–361.
9. *Галкин В.А.* Уравнение Смолуховского. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. 334 с.
10. *Mahoney A.W., Ramkrishna D.* Efficient solution of population balance equations with discontinuities by finite elements // *Chem. Eng. Sci.* 2002. V. 57, N 7. P. 1107–1119.
11. *Матвеев С.А., Тыртышников Е.Е., Смирнов А.П., Бриллиантов Н.В.* Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // *Выч. мет. программирование*. 2014. Т. 15, № 1. С. 1–8.
12. *Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtshnikov E.E.* A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // *J. Comput. Phys.* 2015. V. 282. P. 23–32.
13. *Filbet F., Laurennot P.* Numerical simulation of the smoluchowski coagulation equation // *SIAM J. Sci. Comput.* 2004. V. 25, N 6. P. 2004–2028.
14. *Verkoeijen D., Pouw G.A., Meesters G.M.H., Scarlett B.* Population balances for particulate processes a volume approach // *Chem. Eng. Sci.* 2002. V. 57, N 12. P. 2287–2303.
15. *Ramkrishna D.* Population Balances: Theory and applications to particulate systems in engineering. San Diego: Academic Press, 2000. 365 p.
16. *Barrett J.C., Jheeta J.S.* Improving the accuracy of the moments method for solving the aerosol general dynamic equation // *J. Aerosol Sci.* 1996. V. 27, N 8. P. 1135–1142.
17. *Madras G., McCoy B.J.* Reversible crystal growth dissolution and aggregation breakage: Numerical and moment solutions for population balance equations // *Powder Technol.* 2004. V. 143–144. P. 297–307.
18. *Kruis F.E., Maisels A., Fissan H.* Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation // *AIChE J.* 2000. V. 46, N 9. P. 1735–1742.
19. *Lin Y., Lee K., Matsoukas T.* Solution of the population balance equation using constant-number Monte Carlo // *Chem. Eng. Sci.* 2002. V. 57. P. 2241–2252.
20. *Ranjbar M., Adibi H., Lakestani M.* Numerical solution of homogeneous Smoluchowski's coagulation equation // *Int. J. Comput. Math.* 2010. V. 87, N 9. P. 2113–2122.
21. *Lee M.H.* A survey of numerical solutions to the coagulation equation // *J. Phys. A.* 2001. V. 34, N 47. P. 10219–10241.
22. *Hochbruck M., Ostermann A.* Exponential Runge–Kutta methods for parabolic problems // *Appl. Numer. Math.* 2005. V. 53, N 2–4. P. 323–339.
23. *Seinfeld J.H., Pandis S.* Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change. N.Y.: Wiley, 1988. 1232 p.
24. *Reshetin V.P., Regens J.L.* Simulation modeling of anthrax spore dispersion in a bioterrorism incident // *Risk Analysis.* 2003. V. 23, N 6. P. 1135–1145.
25. *Tsang T.H., Brock J.R.* Simulation of condensation aerosol growth by condensation and evaporation // *Aerosol Sci. Technol.* 1982. V. 2, N 3. P. 311–320.
26. *Марчук Г.И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980. 536 с.
27. *Пененко А.В., Сороковой А.А.* Применение дискретно-аналитических схем для численного решения коагуляционного уравнения Смолуховского // *Интерэкспо ГЕО-СИБИРЬ*. 2015. Т. 4, № 1. С. 140–144.

*A.V. Penenko, A.A. Sorokovoy, K.E. Sorokovaya.* **Numerical model for bioaerosol transformation in the atmosphere.**

Non-stationary mathematical model of bioaerosol dynamics is considered. It is based on nonlinear integral-differential equations describing coagulation, condensation, and evaporation processes. Unconditionally positive numerical schemes for transformation problem is presented. The algorithm is based on discrete analytical approximations using fundamental solutions of local ajoint problems. The model was numerically compared with the models describing individual mechanisms in its composition. The relative contribution of each mechanism in the overall dynamics of aerosol populations is investigated based on numerical experiments.