

Կ.Ա. ԹՈՌՉՅԱՆ

**ՄԹՆՈԼՈՐՏՈՒՄ SO₂ ԳԱԶԻ ԱՐՏԱՆԵՏՄԱՆ ԶԱՐԳԱՑՄԱՆ
ԷՎՈԼՅՈՒՑԻՈՆ ՊԱՏԿԵՐԻ ՀԵՏԱԶՈՏՄԱՆ
ՔՎԱԶԻՄԻԿՐՈՍԿՈՊԻԿ ՄՈՏԵՑՈՒՄ**

Առաջարկված է արտանետվող գազի էվոլյուցիոն պատկերը ստանալու համար քվադրմիկրոսկոպիկ մոտեցում: Խնդրի ֆիզիկական պատկերի քննարկումից բխում է, որ արտանետվող գազն աճող քանակությամբ և իրար հետ փոխազդող բրոունյան մասնիկներից բաղկացած համակարգ է: Ցույց է տրված, որ խնդրի հիմնական բարդությունը փոփոխվող քանակությամբ դիֆերենցիալ հավասարումների համակարգի ինտեգրում կատարելու անհրաժեշտությունն է: Առաջարկված է խնդրի լուծման արդյունավետ ալգորիթ:

Առաջադիմի բառեր. մթնոլորտ, արտանետում, քվադրմիկրոսկոպիկ մոտեցում, ծծմբի երկօքսիդ:

Ներածություն: Բնապահպանության հիմնախնդիրներից մեկն անկասկած կարելի է համարել տարաբնույթ գազերի՝ մթնոլորտում տարածման առանձնահատկությունների հետազոտումը՝ կախված կոնկրետ գազի քիմիական բաղադրությունից, արտանետման հոսքից, մթնոլորտի օդային հոսքերի պատկերից, տվյալ տեղանքի ռելիեֆից և այլն [1,2]: Չնայած՝ արտանետվող գազի էվոլյուցիոն զարգացման ընդհանուր որակական պատկերը բավականաչափ պարզ է, այդուհանդերձ, խնդրի քանակական նկարագրումը բավականաչափ բարդ է: Նշվածն ամբողջությամբ վերաբերում է նկարագրման թե՛ մակրո-ջերմադինամիկական եղանակին և թե՛ միկրոսկոպիկ-վիճակագրական մոտեցմանը: Ջերմադինամիկական եղանակի հիմնական բարդությունն այն է, որ արտանետվող գազը խիստ անհավասարակշիռ վիճակում գտնվող մակրոսկոպիկ օբյեկտ է:

Ինչպես հայտնի է, մակրոսկոպիկ մարմինները, հսկայական քանակությամբ ատոմների պարունակության շնորհիվ, դրսևորում են վիճակագրական որոշակի օրինաչափություններ [3]: Այդ իսկ պատճառով վիճակագրական եղանակի դեպքում համակարգի վիճակը հնարավոր է լինում բնութագրել, այսպես կոչված, բաշխման ֆունկցիայի միջոցով: Բաշխման ֆունկցիաների որոշման համար գոյություն ունեն ինտեգրալ-դիֆերենցիալ հավասարումներ, որոնք անվանվում են կինետիկ հավասարումներ: Հարկ է փաստել, որ ոչ բոլոր իրական դեպքերի համար է հաջողվում մակրոսկոպիկ համակարգի բնութագրման համար համապատասխան կինետիկ հավասարման արտածումը: Կինետիկ հավասարումների հիման վրա կազմակերպված դիտարկումների հիմնական դժվարությունը, թերևս, այդ հավա-

սարքումների չափազանց բարդ լինելն է: Գրեթե միշտ այդ հավասարումների նույնիսկ մոտավոր լուծման ստացումը պահանջում է հսկայաձավալ թվային հաշվարկներ:

Դիտարկվող երևույթի ֆիզիկական պատկերը: Քննարկման առարկան (արտանետվող գազի էվոյուցիան), որպես ֆիզիկական հիմնախնդիր ենթադրում է մեկ գազային վիճակի զարգացման դիտարկումը մեկ այլ գազի ծավալում: Գազի մոլեկուլների շարժման վրա մթնոլորտի ազդեցությունը կրում է պատահական բնույթ՝ պայմանավորված մթնոլորտի մասնիկների հետ անկանոն փոխազդեցությամբ: Վերն ասվածից անմիջապես բխում է, որ միկրոսկոպիկ պատկերը կարելի է որակել որպես բրոունյան շարժում, իսկ ընդհանուր գազի տարածման գործընթացը՝ որպես դիֆուզիա:

Հարկ է նշել, որ արտանետվող գազի պարագայում դիֆուզիան ընթանում է գրավիտացիոն դաշտում, և առկա է դիֆուզիայի ենթարկվող մասնիկների քանակն անընդհատ ավելացնող արտանետման աղբյուր: Վերջինս հաշվառման ենթակա առավել բարդ գործոն է, քանի որ այն պահանջում է արտանետման աղբյուրին մոտ տիրույթներում դիֆուզիոն գործընթացների դիտարկման իրականացում մակրոսկոպիկ քանակությամբ գազային հոսքերի առկայության պարագայում: Հասկանալի է, որ գազային հոսքերը որոշվում են աղբյուրից գազի արտանետման ինտենսիվությամբ, որի փոփոխությունը՝ կախված ժամանակից, կարող է կրել նաև պատահական բնույթ: Մթնոլորտում առկա քամիները ևս կարող են ստեղծել արտանետվող գազի զգալի հոսքեր և, հետևաբար, դրանով իսկ էական ազդեցություն ունենալ արտանետվող գազի էվոյուցիոն պատկերի ձևավորման վրա:

Ուստի այսուհետև կդիտարկենք պատահական ուժադաշտի ազդեցության տակ գտնվող մեխանիկական համախմբի նկարագրման խնդիրը՝ հիմնվելով համապատասխան շարժման հավասարումների լուծման վրա: Առաջարկվող մաթեմատիկական մոդելն իր բնույթով համահունչ է միկրոսկոպիկ մոտեցմանը և, որոշ իմաստով, փորձ է՝ միաժամանակ հսկայական քանակությամբ առանձին մասնիկների շարժմանը հետևելուն: Սովորաբար մակրոսկոպիկ ասելով հասկանում են այն դեպքը, երբ նյութը պարունակում է Ավոգադրոյի թվի կարգի մոլեկուլներ ($6.02 \cdot 10^{23}$): Այդ քանակությամբ մասնիկ պարունակող մեխանիկական համախմբի դիտարկումը ենթադրում է երեք անգամ ավելի շատ քանակությամբ դիֆերենցիալ հավասարումներ պարունակող համակարգի ինտեգրում:

Քվադրմիկրոսկոպիկ մոտեցում: Ստորև շարադրված մոտեցումը որոշակի փորձ է միկրոսկոպիկ տեսության՝ վերը նշված հիմնախնդրի շրջանցման ուղղությամբ: Առաջարկվող մոտեցման համար նպատակահարմար կլինի ներմուծել “քվադրմիկրոսկոպիկ” անվանումը, քանի որ դրանում առաջարկվում է 10^{23} մասնիկների դիտարկումը փոխարինել $10^5 \sim 10^6$ քանակությամբ մասնիկ պարունակող համակարգի դիտարկմամբ [4]: Առաջարկվող մոտեցման հիմքում ընկած է այն ենթադրությունը, որ քիչ քանակությամբ մասնիկներով համակարգի էվոյուցիոն

պատկերը, այնուամենայնիվ, կուրվագծի մեծ քանակությամբ մասնիկներ պարունակող համակարգի էվոլյուցիոն պատկերի ընդհանուր առանձնահատկությունները: Մեթոդում ընտրված համակարգի մասնիկների թվի կարգը պատահական չէ: Այն սահմանափակված է մեկ գերհզոր համակարգչային միավորի ռեսուրսային հնարավորությամբ:

Մթնոլորտում ընդարձակվող գազային գործընթացի ֆիզիկական պատկերի վերաբերյալ վերն արված դատողությունների համաձայն քննարկման օբյեկտի նկարագրան համար, որպես աշխատանքային մոդել, պետք է ընտրվի փոփոխական քանակությամբ մասնիկ պարունակող մեխանիկական համախումբը: Համակարգը բնութագրող հիմնական պարամետրերից մեկի՝ մասնիկների թվի ժամանակից կախված փոփոխական լինելը պահանջում է խնդրի լուծման համար առանձնահատուկ մոտեցման դրսևորում:

Բազմամասնիկային մեխանիկական համախումբը՝ պատահական ֆլուկտուացիոն ֆոնի առկայության դեպքում: Ինչպես հայտնի է, կամայականորեն իրար հետ փոխազդող մասնիկներից բաղկացած մեխանիկական համախմբի էվոլյուցիոն զարգացումը նկարագրվում է դիֆերենցիալ հավասարումների համակարգով՝ գրված առանձին մասնիկների կոորդինատների ժամանակային կախվածության համար: Համակարգի i -րդ մասնիկի վրա ազդող $\vec{F}_i$ ուժը բաժանելով արտաքին /external/ և ներքին /internal/ բաղադրիչների, կունենանք՝

$$\vec{F}_i = \vec{F}_i^{\text{int}} + \vec{F}_i^{\text{ext}}, \quad (1)$$

որտեղից այդ համակարգի համար կարող ենք գրել՝

$$m \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i^{\text{int}} + \vec{F}_i^{\text{ext}}, \quad i = 1, \dots, N: \quad (2)$$

Այստեղ $\vec{r}_i$ -ն i -րդ մասնիկի դիրքը նկարագրող շառավիղ-վեկտորն է, m -ը՝ համակարգի մասնիկի զանգվածը (ենթադրվում է, որ համակարգը բաղկացած է միանման մասնիկներից), $\vec{F}_i^{\text{int}}$ -ը բնութագրում է համակարգի ներսում մասնիկների միջև փոխազդեցությունը, $\vec{F}_i^{\text{ext}}$ -ն արտահայտում է արտաքին ուժաղաշտերի ազդեցությունը մասնիկի վրա, N -ը համակարգում մասնիկների քանակն է:

Արտաքին ուժաղաշտի բնույթի վերաբերյալ վերն արված քննարկումից հետևում է, որ բոլոր մասնիկների համար այն ունի ինչպես որոշակի, այնպես էլ պատահական բաղադրիչ, և հետևաբար՝ կարող ենք գրել

$$\vec{F}_i^{\text{ext}} = -\chi \frac{d \vec{r}_i(t)}{dt} - mg\vec{k} + \vec{F}_i^{\text{random}}, \quad (3)$$

որտեղ $\vec{F}_i^{\text{random}}$ i -րդ մասնիկի շարժմանը գուգորդող $\vec{F}^{\text{random}}$ պատահական ուժի որևէ իրականացում է:

Ենթադրելով, որ համակարգի մասնիկների միջև գործում են զույգ առ զույգ փոխազդեցության ուժեր, կարող ենք գրել՝

$$\vec{F}_i^{\text{int}} = \sum_{k=1}^N \vec{F}_{ik}, \quad i \neq k, \quad (4)$$

որտեղ $\vec{F}_{ik}$ -ն i -րդ մասնիկի վրա k -րդ մասնիկի կողմից ազդող ուժն է: $i \neq k$ պայմանը բացառում է մասնիկի ինքնազդեցությունը: Օգտագործելով (2)-ը, (1)-ի համար կարող ենք գրել՝

$$\begin{cases} m \frac{d^2 \vec{r}_1(t)}{dt^2} = \vec{F}_{12} + \vec{F}_{13} + \dots + \vec{F}_{1N} - \chi \vec{u}_1(t) - m \vec{g} + \vec{F}_1^{\text{random}}, \\ m \frac{d^2 \vec{r}_2(t)}{dt^2} = \vec{F}_{21} + \vec{F}_{23} + \dots + \vec{F}_{2N} - \chi \vec{u}_2(t) - m \vec{g} + \vec{F}_2^{\text{random}}, \\ \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \\ m \frac{d^2 \vec{r}_N(t)}{dt^2} = \vec{F}_{N1} + \vec{F}_{N2} + \dots + \vec{F}_{NN-1} - \chi \vec{u}_N(t) - m \vec{g} + \vec{F}_N^{\text{random}}, \end{cases} \quad (5)$$

որտեղ $\vec{u}_i(t) = d\vec{r}_i(t)/dt$ -ն i -րդ մասնիկի շարժման արագությունն է:

Միարժեք լուծում ստանալու համար այս հավասարումների համակարգը պետք է լրացվի նաև բոլոր մասնիկների համար շարժման սկզբնապայմաններով՝ $\vec{r}_1(0) = \vec{r}_1^0$, $\vec{r}_2(0) = \vec{r}_2^0$, ..., $\vec{r}_N(0) = \vec{r}_N^0$ և $\vec{u}_1(0) = \vec{u}_1^0$, $\vec{u}_2(0) = \vec{u}_2^0$, ..., $\vec{u}_N(0) = \vec{u}_N^0$: Հարկ է նաև նշել, որ ելնելով արտանետման աղբյուրի բնույթից, ընդհանրապես ասած՝ շարժման սկզբնական պայմանները ևս պետք է համարվեն պատահական մեծություններ: Պատահական կարող է լինել նաև միավոր ժամանակում արտանետված մասնիկների քանակը:

Միջմասնիկային փոխազդեցության ուժերի բնույթի վերաբերյալ բազմաթիվ մոդելներ կան: Չեզոք մասնիկների դեպքում առավել իրատեսական մոդելները ենթադրում են, որ միջմասնիկային փոխազդեցության ուժերը կենտրոնական են և կախված են միայն միջմասնիկային հեռավորությունից՝

$$\vec{F}_{ik} = \vec{F}(\vec{r}_i(t), \vec{r}_k(t)) = f(r_{ik}) \frac{\vec{r}_{ik}}{r_{ik}}, \quad (6)$$

որտեղ $\vec{r}_{ik}$ -ն i -րդ և k -րդ մասնիկների փոխադարձ դիրքը բնութագրող վեկտորն է, իսկ $r_{ik} = |\vec{r}_{ik}|$ -ն՝ միջմասնիկային հեռավորությունը: Նկատենք, որ ուժերի կենտրոնական լինելն ապահովում է փոխազդեցության ժամանակ իմպուլսի և էներգիայի համատեղ պահպանումը:

Թվային հաշվարկների իրականացման և դրանց վերահսկման նկատառումներից ելնելով՝ դիմենք (6) դիֆերենցիալ հավասարումների համակարգի վերջավոր տարբերություններով գրառման ձևին: Այդ նպատակով տրոհենք դիտարկման ամբողջ t ժամանակը Δt փոքր ժամանակահատվածների: Ներմուծելով $t = n\Delta t$ ժամանակի պահի համար i -րդ մասնիկի շառավիղ-վեկտորի $\vec{r}_i(n\Delta t) = \vec{r}_i(n)$ նշանակումը՝ (6)-ի կամայական i -րդ հավասարման համար կարող ենք գրել՝

$$m \frac{\vec{r}_i(n+2) - 2\vec{r}_i(n+1) + 2\vec{r}_i(n)}{\Delta t^2} = \sum_{k=i}^N \vec{F}(\vec{r}_i(n+1), \vec{r}_k(n+1)) - \chi \frac{\vec{r}_i(n+1) - \vec{r}_i(n)}{\Delta t} - mg\vec{k} + \vec{F}_i^{\text{rand}}(n+1), i \neq k, \quad (7)$$

որտեղ $\vec{F}_i^{\text{rand}}(n+1)$ -ը i -րդ մասնիկի վրա $(n+1)\Delta t$ ժամանակահատվածում ազդող պատահական ուժն է, իսկ գումարելիներով անդամը համապատասխանում է նույն ժամանակահատվածում i -րդ մասնիկի վրա համակարգի մնացած մասնիկների կողմից ազդող ուժին:

Հետագայում մեր հաշվարկներում սահմանափակվելու ենք միջմասնիկային փոխազդեցության, այսպես կոչված, Լեոնարդ-Ջոնսի մոդելով, երբ փոխազդեցության պոտենցիալ էներգիան ունի հետևյալ տեսքը՝

$$U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{A}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{12}} - \frac{B}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^6}, \quad (8)$$

որտեղ A -ն և B -ն գրոյից մեծ հաստատուններ են, որոնց արժեքները կախված են փոխազդող մոլեկուլների տեսակից: Հայտնի է, որ (8) պոտենցիալը բավականաչափ լավ է նկարագրում փոխազդեցությունը բնեռային մոլեկուլների միջև: Օգտվելով (8)-ից՝ փոխազդեցության ուժի համար կարող ենք գրել

$$\vec{F}_{ik} = \left(\frac{A}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^{13}} - \frac{B}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^7} \right) \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (9)$$

Այս բանաձևերից երևում է, որ մոլեկուլների միջև փոքր $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ հեռավորությունների դեպքում ուժը հիմնականում պայմանավորված է A պարունակող անդամով, և այն ունի վանողական բնույթ: Մեծ $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ -ի դեպքում ուժի մեծությունը հիմնականում որոշվում է B պարունակող անդամով, և մասնիկների միջև փոխազդեցությունը ձգողական է:

Նշենք, որ միջմասնիկային փոխազդեցության անտեսման պարագայում ($\vec{F}_{ik} = 0$, բոլոր i և k երի համար) (5) հավասարումների համակարգը վերածվում է առանձին անկախ հավասարումների:

Փոփոխական քանակությամբ մասնիկներից բաղկացած մեխանիկական համախմբի մաթեմատիկական մոդելը: Դիցուք միավոր ժամանակում աղբյուրն արտանետում է v քանակությամբ մասնիկ այնպես, որ Δt փոքր ժամանակահատվածում արտանետված մասնիկների ΔN քանակի համար կարող ենք գրել՝

$$\Delta N = v(t)\Delta t: \quad (10)$$

Ընդհանրապես v մեծությունը կարող է ունենալ ժամանակային կախվածություն, որն իր հերթին կարող է լինել ինչպես դետերմինիստական, այնպես էլ պատահական բնույթի: Եթե մասնիկների արտահոսքն ընթանում է $t = 0$ պահից

հետո, ընդ որում՝ կայուն արագությամբ՝ $v = \text{const}$, ուստի, կախված ժամանակից, համակարգում մասնիկների քանակը փոփոխվում է զծային օրենքով՝

$$N = vt: \quad (11)$$

Խնդիրը չսահմանափակելու նպատակով ենթադրենք, որ արտահոսքը, կախված ժամանակից, կարող է ընթանալ տարբեր արագություններով, և ներմուծենք հետևյալ նշանակումները. ΔN_1 -ը՝ աղբյուրից արտահոսած մասնիկների թիվն առաջին Δt ժամանակահատվածում, ΔN_2 -ը՝ արտահոսած մասնիկների թիվը երկրորդ Δt ժամանակահատվածում և այլն: Հասկանալի է, որ ժամանակի կամայական $p\Delta t$ ($p = 1, 2, \dots$) պահի համար մասնիկների թիվը կկազմի՝

$$N(p) = \sum_{k=1}^p \Delta N_k: \quad (12)$$

Առաջին $k=1$ քայլում համակարգը պարունակում ΔN_1 իրար հետ փոխազդող մասնիկներ, որոնց համար հայտնի են շարժման սկզբնական պայմանները: Այլ կերպ ասած, այդ ժամանակահատվածի սկզբնական և վերջնական պահերին բոլոր մասնիկների դիրքերը կլինեն՝

$$\vec{r}_i(0) = \vec{r}_i^0; \quad \vec{r}_i(1) = \vec{r}_i^1 \quad 1 \leq i \leq \Delta N_1: \quad (13)$$

Նկատենք, որ $\vec{u}_i(1) = (\vec{r}_i(1) - \vec{r}_i(0)) / \Delta t$ ՝ մասնիկի արագությունն է առաջին ժամանակահատվածում: Այս մասնիկների $2\Delta t$ պահին դիրքերի, այսինքն $\vec{r}_i(2)$ ($1 \leq i \leq \Delta N_1$) մեծությունների համար, ելնելով (7)-ից, կարող ենք գրել՝

$$\vec{r}_i(2) = 2\vec{r}_i(1) - \vec{r}_i(0) + \left(\sum_{j=1}^{\Delta N_1} F(\vec{r}_i(1), \vec{r}_j(1)) - \chi \frac{\vec{r}_i(1) - \vec{r}_i(0)}{\Delta t} - g\vec{k} + \vec{F}_i^{\text{rand}}(1) \right) \frac{\Delta t^2}{m}, \quad j \neq i: \quad (14)$$

Հաշվարկի $k=2$ քայլում համակարգի մասնիկների քանակը պետք է համարել $\Delta N_1 + \Delta N_2$: Խնդիրն այժմ $3\Delta t$ պահին այդ մասնիկների դիրքերը որոշելն է: Այլ կերպ ասած, որոնելի են $\vec{r}_i(3)$ -ները ($1 \leq i \leq \Delta N_1 + \Delta N_2$) = $N(2)$ (տե՛ս (12)): Համաձայն (7)-ի՝ կարող ենք գրել՝

$$\vec{r}_i(3) = 2\vec{r}_i(2) - \vec{r}_i(1) + \left(\sum_{j=1}^{N(2)} F(\vec{r}_i(2), \vec{r}_j(2)) - \chi \frac{\vec{r}_i(2) - \vec{r}_i(1)}{\Delta t} - g\vec{k} + \vec{F}_i^{\text{rand}}(2) \right) \frac{\Delta t^2}{m}, \quad j \neq i: \quad (15)$$

Ինչպես երևում է բերված բանաձևից, մասնիկների դիրքերը՝ $\vec{r}_i(3)$ -ը, ժամանակի $t = 3\Delta t$ պահի համար որոշվում են այդ մասնիկների դիրքերով $t = \Delta t$ և $t = 2\Delta t$ պահերին՝ $\vec{r}_i(1)$, $\vec{r}_i(2)$, համապատասխանաբար:

Վերն ասվածից բխում է, որ շարժման միարժեքության համար պետք է երկրորդ Δt ժամանակահատվածում համակարգ ներմուծված մասնիկների համար տալ շարժման սկզբնական պայմաններ, ինչը ենթադրում է, որ այդ մասնիկների համար հայտնի են դրանց դիրքերը Δt և $2\Delta t$ պահերին, այսինքն՝

$$\vec{r}_i(1) = \vec{r}_i^1; \quad \vec{r}_i(2) = \vec{r}_i^2 \quad \Delta N_1 < i \leq N(2): \quad (16)$$

Առաջին Δt ժամանակահատվածում համակարգ ներմուծված մասնիկների դիրքերը ժամանակի $t = \Delta t$ և $t = 2\Delta t$ պահերի համար որոշվում են համապատասխանաբար (13) և (14)-ից:

Հիմնվելով վերն արված դատողությունների վրա՝ կարելի է առաջարկել ընդհանուր ալգորիթի համակարգի էվոլյուցիոն պատկերի նկարագրման համար ցանկացած p -րդ քայլում: Հասկանալի է, որ ժամանակի $p\Delta t$ պահին խնդրի պարամետրերը՝ մասնիկների դիրքերը, պարզ հանրահաշվորեն կապվում են $(p-1)\Delta t$ և $(p-2)\Delta t$ պահերին մասնիկների ունեցած դիրքերի հետ՝

$$\begin{aligned} \vec{r}_i(p) &= 2\vec{r}_i(p-1) - \vec{r}_i(p-2) + \\ &+ \left(\sum_{j=1}^{N(p-1)} F(\vec{r}_i(p-1), \vec{r}_j(p-1)) - \chi \frac{\vec{r}_i(p-1) - \vec{r}_i(p-2)}{\Delta t} - g\vec{k} + \vec{F}_i^{\text{rand}}(p-1) \right) \frac{\Delta t^2}{m}, \quad j \neq i, \end{aligned} \quad (17)$$

որտեղ $(p-1)\Delta t$ ժամանակահատվածում համակարգ ներմուծված մասնիկների ($N(p-2) < j \leq N(p-1)$) դիրքերը համապատասխան պահերին որոշվում են իրենց շարժման սկզբնապայմաններից՝

$$\vec{r}_i(p-2) = \vec{r}_i^{p-2}; \quad \vec{r}_i(p-1) = \vec{r}_i^{p-1} \quad N(p-2) < i \leq N(p-1): \quad (18)$$

Մինչև $(p-2)\Delta t$ պահը համակարգ ներմուծված մասնիկների դիրքերը $(p-1)\Delta t$ և $(p-2)\Delta t$ պահերին որոշելու համար (17), (18)-ում p -ն պետք է դիտարկել որպես փոփոխական մեծություն՝ հաջորդաբար տալով 1-ից մինչև $(p-2)$ արժեքներ:

Փվային հաշվարկներ: Կատարված է թվային մոդելավորում՝ օգտագործելով Ալավերդի քաղաքում տեղակայված Պղնձաձուլական գործարանից ծծմբի երկօքսիդի արտանետումների և այդ տարածաշրջանի համար բնորոշ քամիների վարդի միջինացված տվյալներ:

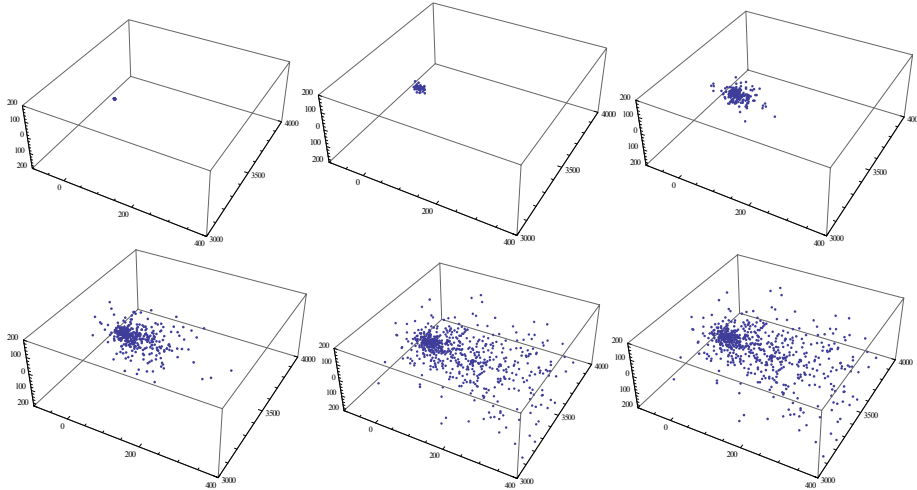
Քաղաքի մթնոլորտային օդում արտանետումներից առավելագույնի՝ ծծմբի երկօքսիդի ցրումը մթնոլորտի գետնամերձ շերտում գնահատելու նպատակով կիրառվել է մշակված մաթեմատիկական մոդելը, որի արդյունքում ստացվել են նաև 3D գրաֆիկական պատկերներ: Մոդելավորումը կատարվել է՝ հաշվի առնելով Հայիդրոմետի կողմից սահմանված քամիների վարդը:

Քամիների դաշտի յուրաքանչյուր կետում, մթնոլորտային արտանետման աղբյուրից արտանետումների ժամանակային և քանակական փոփոխմանը զուգընթաց, գնահատվել է մթնոլորտային առավելագույն աղտոտիչի՝ պղնձաձուլական գործարանի արտանետման տարածումը:

Հաշվարկների արդյունքում մթնոլորտային աղտոտվածության ստացված սեկտորները, առավել տեսողական ընկալման նպատակով, բաժանվել են աղտոտման չորս պայմանական գոտիների՝ բաժանված աղտոտվածության եզրային բացարձակ արժեքներով (0.6; 0.22; 0.15 և 0.1 $\mu\text{g}/\mu^3$): Ստացված բացարձակ արժեքները համեմատվել են դիտարկված առավելագույն կոնցենտրացիայի արժեքի (0.5 $\mu\text{g}/\mu^3$) հետ: Ընդ որում, առաջին գոտում կազմակերպված արտանետման

աղբյուրից 90մ հեռավորության վրա առավելագույն կոնցենտրացիան գերազանցել է 45.7 անգամ, 180 մ հեռավորության վրա՝ 17.4 անգամ, առաջին գոտու եզրագծում՝ 1.2 անգամ:

Ծրագրային փաթեթի աշխատանքի արդյունքում ստացվել են նաև 3D պատկերներ (նկ.):



Նկ. 3D պատկերներ

Եզրակացություն: Աշխատանքում առաջարկված է ընդհանուր ալգորիթմ՝ համակարգի էվոյուցիոն պատկերի նկարագրման համար ցանկացած քայլում: Հասկանալի է, որ ժամանակի կամայական պահին խնդրի պարամետրերը՝ մասնիկների դիրքերը, պարզ հանրահաշվորեն կապվում են տվյալ պահից մեկ քայլ առաջ մասնիկների դիրքերի հետ: Աշխատանքի արդյունքում ստացված մաթեմատիկական մոդելը կիրառվել է հանրապետության, ծծմբի երկօքսիդի արտանետումներով ամենահագեցած տարածաշրջաններից մեկում՝ Ալավերդի քաղաքում: Մշակված մաթեմատիկական մոդելն օգտագործվել է քաղաքի մթնոլորտային օդում արտանետումներից առվելագույնի՝ ծծմբի երկօքսիդի ցրումը մթնոլորտի գետնամերձ շերտում գնահատելու նպատակով, որի արդյունքում ստացվել են նաև 3D գրաֆիկական պատկերներ: Մոդելավորումը կատարվել է՝ հաշվի առնելով Հայիիդրոմետի կողմից սահմանված քամիների վարդը:

ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ՑԱՆԿ

1. **Ветошкин А.Г.** Защита атмосферы от газов.- Пенза: Изд-во Пенз. гос. ун-та, 2004. - 201с.
2. **Тищенко Н.Ф.** Охрана атмосферного воздуха. Расчет содержания вредных веществ и их распределение в воздухе: Справ. изд. – М.: Химия, 1991. – 368 с.
3. **Климантович Ю.Л.** Статистическая физика.- М.: Наука, 1982. – 608 с.
4. **Климонтович Ю.Л.** Нелинейное броуновское движение. УФН 164. 1994.- 32 с.

ՀՊՃՀ (Պոլիտեխնիկ). Նյութը ներկայացվել է խմբագրություն 6.09.2011:

К.А. ТОРЧЯН

КВАЗИМИКРОСКОПИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ ЭВОЛЮЦИОННОЙ КАРТИНЫ РАЗВИТИЯ ВЫБРОСОВ ГАЗА SO₂ В АТМОСФЕРЕ

Представлен квазимикроскопический подход для получения эволюционной картины выбрасываемого газа. Из обсуждения физического отображения задачи следует, что выбрасываемый газ представляет собой систему, состоящую из растущих в числе и взаимодействующих между собой броуновских частиц. Показано, что основная сложность задачи состоит в том, что необходимо произвести интеграцию системы с переменным количеством дифференциальных уравнений. Представлен эффективный алгоритм для решения задачи.

Ключевые слова: атмосфера, выброс, квазимикроскопический подход, двуокись серы.

K.A. TORCHYAN

QUASIMICROSCOPIC APPROACH TO THE RESEARCH OF EVOLUTIONAL PATTERN OF SO₂ GAS EMISSION PROGRESS

A quasimicroscopic approach for getting the evolutionary pattern of the ejected gas is presented. It follows from the consideration of the problem's physical representation that the ejected gas is a system which consists of interacting growing in number and Brownian particles. It is shown that the main difficulty of the problem is that it is necessary to perform an integration of a system with variable number of differential equations. An effective algorithm for solving the problem is presented.

Keywords: atmosphere, emission, quasimicroscopic approach, sulphur dioxide.