

5. Журавков В. В., Тонконогов Б. А., Шалькевич П. К. Разработка веб-ориентированного интерфейса для проведения ретроспективного анализа данных системы онлайн-мониторинга состояния компонентов окружающей среды г. Орши и оршанского района / В. В. Журавков, Б. А. Тонконогов, П. К. Шалькевич // Сахаровские чтения 2022 года: экологические проблемы XXI века = Sakharov readings 2022 : environmental problems of the XXI century : материалы 22-й Международной научной конференции, 19–20 мая 2022 г., г. Минск, Республика Беларусь : в 2 ч. / Междунар. гос. экол. ин-т им. А. Д. Сахарова Бел. гос. ун-та; редкол. : А. Н. Батян [и др.] ; под ред. д-ра ф.-м. н., проф. С. А. Маскевича, к. т. н., доцента М. Г. Герменчук. – Минск : ИВЦ Минфина, 2022. – Ч. 2. – 346 с. – Минск, 2022. – С. 360-363.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИИ В СМЕСИ ИДЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ С УЧЕТОМ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФфуЗИИ ОТ ЭНТРОПИИ СМЕШЕНИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

COMPUTER SIMULATION OF DIFFUSION IN A MIXTURE OF IDEAL GASES TAKEN INTO ACCOUNT OF THE DEPENDENCE OF THE DIFFUSION COEFFICIENT ON THE ENTROPY OF MIXING USING THE FINITE DIFFERENCE METHOD

П. К. Шалькевич¹, Д. С. Мишляков¹, Н. Н. Гринчик²

P. K. Shalkevich¹, D. S. Mishlakov¹, N. N. Grinchik²

*¹Учреждение образования «Международный государственный экологический институт имени А. Д. Сахарова» Белорусского государственного университета, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ
г. Минск, Республика Беларусь*

*²Институт тепло- и массообмена имени А.В.Лыкова НАН Беларуси
г. Минск, Республика Беларусь
shalkevich@iseu.by*

*¹International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU
Minsk, the Republic of Belarus*

*²A.V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus
Minsk, the Republic of Belarus*

Разработан укрупненный вычислительный алгоритм компьютерного моделирования диффузии газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения с применением метода конечных разностей, получены результаты компьютерного моделирования на основе разработанного алгоритма. Компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения с применением метода конечных разностей выполнено впервые.

An enlarged computational algorithm for computer modeling of gas diffusion has been developed, taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing using the finite difference method, and the results of computer modeling based on the developed algorithm have been obtained. Computer simulation of diffusion in a mixture of ideal gases, taking into account the dependence of the diffusion coefficient on the entropy of mixing using the finite difference method, was performed for the first time.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, вычислительный алгоритм, диффузия газов, метод конечных разностей.

Keywords: computer modeling, computational algorithm, gas diffusion, finite difference method.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2024-2-261-264>

В современных научных исследованиях проблема моделирования диффузии в газовых смесях обретает актуальность [1]. Это напрямую связано с востребованностью в промышленности и относительной не совершенностью существующих моделей, описывающих процессы диффузии газов. Следовательно, актуальным становится и применение численных методов и вычислительных алгоритмов для компьютерного моделирования диффузии газов, которые могут быть применены в изучении природы смешивания газов, а также в решении проблем загрязнения окружающей среды и обеспечении безопасности промышленных процессов [2].

Наиболее популярными методами компьютерного моделирования диффузии в смесях идеальных газов являются [2]:

Численные методы. Включают в себя метод конечных разностей, который используются для дискретизации уравнений диффузии в пространстве и времени, позволяя проводить численное решение задачи. Также

к численным методам относится метод конечных элементов: он обеспечивает более точное описание геометрии системы, разбивая пространство на конечные элементы и проводя численные вычисления в каждом элементе.

Молекулярная динамика. Основывается на симуляции движения молекул в газовой среде, позволяя более детально оценивать их взаимодействие и траектории.

Пространственный анализ. Подразумевает выделение потенциальных очагов диффузии. Такой метод используется для выявления областей с высокой концентрацией веществ, что помогает идентифицировать потенциальные источники загрязнения. Далее осуществляется оценка распределения компонентов в пространстве с учетом алгоритмов визуализации и анализа результатов моделирования, обеспечивающих понимание характеристик диффузии в различных частях газовой среды.

Эти методы могут применяться в совокупности, что позволит проводить комплексное моделирование диффузии в смесях идеальных газов, учитывая, как основные физические принципы, так и особенности пространственного распределения компонентов.

Компьютерные технологии моделирования диффузии газов. Компьютерное моделирование диффузии газов подразумевает применение соответствующих технологий. Для этого применяются различные языки программирования в зависимости от условий решаемой задачи. Например, для высокопроизводительных вычислений часто используются Fortran и C++, в то время как Python и MATLAB применяются для прототипирования и алгоритмической разработки.

Библиотеки и фреймворки, такие как OpenFOAM для численного моделирования и LAMMPS для молекулярной динамики, дополняют языки программирования. Параллельные вычисления на графических процессорах обеспечиваются с использованием технологий CUDA и OpenCL. Среди сред разработки выделяются Jupyter Notebooks для интерактивной разработки и GitHub/GitLab для управления версиями и совместной работы.

Существенное значение имеют среды высокопроизводительных вычислений и облачные платформы, такие как Amazon EC2, Google Cloud и Microsoft Azure, обеспечивающие доступ к масштабируемым ресурсам для обработки объемных данных. Для эффективного управления геоданными их хранения в базах данных, таких как PostgreSQL/PostGIS, Oracle Spatial и Microsoft SQL Server, что зависит от конкретных требований проекта. Таким образом, комбинирование разнообразных технологий и языков программирования позволяет создавать гибкие и эффективные методы и алгоритмы для компьютерного моделирования диффузии в идеальных газах.

Разработка вычислительных алгоритмов для компьютерного моделирования диффузии газов. Вычислительные алгоритмы компьютерного моделирования диффузии в смесях газов играют ключевую роль в прогнозировании распространения загрязняющих веществ в атмосфере. В отличие от задач прогнозирования миграции поллютантов в почве [3] и воде [4], физические процессы, лежащие в основе распространения воздушных загрязнителей, обладают своими уникальными особенностями. Для разработки вычислительных алгоритмов для компьютерного моделирования диффузии газов необходимо выполнить следующие этапы:

1) Выбор математической модели. Используются математические модели, описывающие перемещение идеальных газов в атмосфере. Например, может применяться уравнение Навье-Стокса или же уравнение, представленное в [1], в котором учтена энтропия.

2) Выбор численного метода для расчета математической модели.

3) Использование расчетных сеток. Применяются расчетные сетки для представления пространственных областей, где каждая ячейка содержит информацию о концентрации газов. Адаптивные сетки позволяют увеличивать разрешение в зонах особого интереса.

4) Учет физических параметров газов. Включает в себя учет термодинамических характеристик газов, таких как температура, давление и концентрация, для точного моделирования их диффузии.

5) Оптимизация вычислений. Применение методов оптимизации для эффективного использования вычислительных ресурсов. Распараллеливание и высокопроизводительные вычислительные платформы могут использоваться для ускорения процесса моделирования.

6) Валидация, верификация моделей. Этот важный этап включает валидацию результатов моделирования путем сравнения с экспериментальными данными и реальными наблюдениями [5].

Разработка вычислительного алгоритма компьютерного моделирования диффузии газов. Для решения задачи компьютерного моделирования диффузии газов авторами была выбрана математическая модель, представленная в [1], в качестве численного метода был выбран метод конечных разностей. Выбор численного метода обусловлен простотой его реализации. Задача решалась в одномерной постановке. Последовательность действий при решении поставленной задачи:

1) инициализация параметров: длина пространства l , время прогнозирования T , количество пространственных узлов n_x , количество временных шагов n_t , коэффициент диффузии D , шаг по времени t , и шаг по пространству x ;

2) инициализация начальных условий: создание пространственного массива с заданной длиной и заполнение его начальными условиями (градиентом концентрации газа);

3) численное решение уравнения диффузии: выполнение цикла по времени и вложенного в него цикла по пространству, заполнение значения концентрации газа в каждой ячейке, используя метод конечных разностей;

4) визуализация результатов: создание массива с пространственными координатами, построение графика концентрации газа в зависимости от пространственной координаты, отображение графика с результатами моделирования.

Укрупненный вычислительный алгоритм компьютерного моделирования диффузии газов с применением метода конечных разностей показан на рисунке 1.

Компьютерное моделирование диффузии газов с применением метода конечных разностей. Для разработки программы для моделирования диффузии в смеси газов на основе разработанного вычислительного алгоритма был выбран язык программирования Python и использованы библиотеки NumPy и SciPy для численных вычислений. Программа будет представлять собой основы численной модели, адаптированные для задачи диффузии в идеальных газах.

На рисунке 2 приведен результат выполнения программы.



Рисунок 1 – Укрупненный вычислительный алгоритм компьютерного моделирования диффузии газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения с применением метода конечных разностей

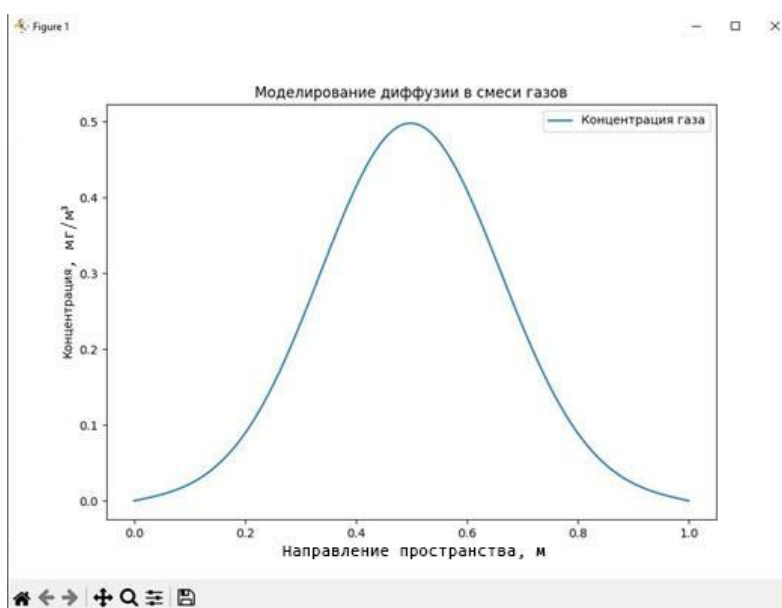


Рисунок 2 – Результаты компьютерного моделирования диффузии газов с применением метода конечных разностей

Компьютерное моделирование диффузии в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения согласно [1] с применением метода конечных разностей выполнено впервые. Полученные результаты требуют дальнейшей верификации с использованием результатов экспериментальных измерений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гринчик Н.Н., Заяц Г.М. Диффузия в смеси идеальных газов с учетом зависимости коэффициента диффузии от энтропии смешения / Н. Н. Гринчик, Г. М. Заяц // XXI Международная научная конференция по дифференциальным уравнениям (Еругинские чтения – 2023): материалы конф.: в 2 ч. / Ин-т мат. нац. акад. наук Беларуси, Белорус. гос. ун-т, Белорус.-Рос. ун-т; редкол.: В. В. Амелькин [и др.]. – Могилев: Белорус.-Рос. ун-т, 2023. – Ч. 2. – 169 с. – Могилев, 2023. – С. 81-83.
2. Computational Methods for Gas Diffusion Modeling / J. R. Smith, A. B. // Doe Environmental Modeling Journal. – 2010. – 25(2). – Р. 123-137.
3. Шалькевич, П. К. Компьютерное прогнозирование пространственного распределения концентрации Cs-137 в почве / П. К. Шалькевич // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2021. – Т. 65, № 2. – С. 139-145.
4. Плесканев В. В., Шалькевич П. К., Липницкий Л. А. Географические информационные системы мониторинга миграции загрязняющих веществ в почвах и водах в контексте улучшения экологической обстановки / В. В. Плесканев, П. К. Шалькевич, Л. А. Липницкий // Сахаровские чтения 2023 года: экологические проблемы XXI века = Sakharov readings 2023 : environmental problems of the XXI century : материалы 23-й Международной научной конференции, 18–19 мая 2023 г., г. Минск, Республика Беларусь : в 2 ч. / Междунар. гос. экол. ин-т им. А. Д. Сахарова Бел. гос. ун-та; редкол.: А. Н. Батын [и др.]; под ред. д-ра б. н., доцента О. И. Родькина, к. т. н., доцента М. Г. Герменчук. – Минск : ИВЦ Минфина, 2023. – Ч. 2. – 384 с. – Минск, 2023. – С. 320-324.
5. Шалькевич, П. К., Кундас, С. П. Верификация численных методов и математической модели, разработанных для моделирования миграции радионуклидов в природных дисперсных средах / П. К. Шалькевич, С. П. Кундас // Доклады БГУИР. – 2021. – Т. 19, № 3. – С. 66-74.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИННОВАЦИОННЫХ ГИС ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ РЕТРОСПЕКТИВНОЙ ОЦЕНКЕ ДОЗОВЫХ НАГРУЗОК И ВАРИАБЕЛЬНОСТИ ХАРАКТЕРИСТИК ИЗЛУЧЕНИЯ НА РЕФЕРЕНТНЫЕ ВИДЫ ВОДНОЙ И НАЗЕМНОЙ БИОТЫ

USE OF INNOVATIVE GIS TECHNOLOGIES IN RETROSPECTIVE ASSESSMENT OF DOSE LOADS AND VARIABILITY OF RADIATION CHARACTERISTICS ON REFERENCE SPECIES OF AQUATIC AND TERRESTRIAL BIOTA

В. В. Журавков, А. П. Голубев, О. А. Антонович

V. V. Zhuravkov, A. P. Golubev, O. A. Antonovich

*Учреждение образования «Международный государственный экологический институт
имени А. Д. Сахарова» Белорусского государственного университета, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ
г. Минск, Республика Беларусь
zhvl@mail.ru*

*International Sakharov Environmental Institute of Belarusian State University, ISEI BSU
Minsk, the Republic of Belarus*

В статье представлены результаты работы, выполненной в рамках НИР «Оценить дозовые нагрузки и эффекты ионизирующих излучений в сочетании со стрессом различной природы на биоту в зоне хронического радиационного воздействия», ГПНИ «Природные ресурсы и окружающая среда» подпрограммы «Радиация и биологические системы» на 2021-2025 годы.

The article presents the results of the work carried out within the framework of the research work “Assess dose loads and effects of ionizing radiation in combination with stress of various natures on biota in the zone of chronic radiation exposure”, State Public Research Institute “Natural Resources and Environment” subprogram “Radiation and Biological Systems” for 2021- 2025.

Ключевые слова: радиоактивное загрязнение, радионуклиды 90Sr, 137Cs и 241Am, референтные виды водной и наземной биоты, поглощенные дозы.

Keywords: radioactive contamination, radionuclides 90Sr, 137Cs and 241Am, reference species of aquatic and terrestrial biota, estimated doses.

<https://doi.org/10.46646/SAKH-2024-2-264-268>