

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ДЛЯ РАСЧЕТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ МЕТОДОМ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

© 2011 С.В. Губарев², Д.Б. Берг^{1,2,3}, А.П. Сергеев¹

¹ Институт промышленной экологии УрО РАН, г. Екатеринбург

² Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург

³ Международный институт Александра Богданова, г. Екатеринбург

Поступила в редакцию 01.10.2011

Статья посвящена комплексу программ для расчета процессов массопереноса загрязняющих веществ в атмосфере методом имитационного моделирования в вычислительной среде клеточных автоматов. Представлена общая схема работы комплекса. Приводится сравнение результатов расчетов по имитационным моделям с аналитическими решениями уравнения турбулентной диффузии в различных приближениях.

Ключевые слова: *имитационное моделирование, клеточные автоматы, процессы массопереноса*

Загрязнение атмосферы веществами, вызывающими деградацию среды обитания и наносящее ущерб здоровью населения, остается наиболее острой экологической проблемой, имеющей приоритетное социальное и экономическое значение. В настоящее время существует достаточно большое количество программных комплексов для расчета уровня загрязнения и экологического мониторинга. Основная трудность при создании программ для расчета загрязнений атмосферы и формирования полей поверхностных загрязнений заключается в сложности моделирования атмосферных процессов. Многообразие природных явлений, сложность и неоднородность граничных условий не позволяют получить точные аналитические решения поставленных задач. Возможным выходом в данной ситуации является использование численных методов и имитационного моделирования, которые реализуются расчетными программными комплексами. Все многообразие существующего программного обеспечения в области моделирования атмосферных загрязнений можно разделить на 3 категории.

1. Расчет концентрации загрязнения производится при решении систем ДУ, описывающих атмосферные процессы. К таким пакетам относятся ADMS3, AERMOD, CALLPUF, BLP и другие [1].

Губарев Семен Викторович аспирант. E-mail: tnpogono@gmail.com

Берг Дмитрий Борисович доктор физико-математических наук, профессор, старший научный сотрудник. E-mail: bergd@mail.ru

Сергеев Александр Петрович, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, старший научный сотрудник. E-mail: sergeev@ecko.uran.ru

2. Расчет концентрации загрязнения производится по методикам, созданным на основе расчетов по ДУ и эмпирическим данным. К таким программам относятся серия программ «Эколог», «Эра», «Кедр» [2].

3. Расчет концентраций загрязнения производится на основе имитационных моделей. Такие модели реализуются, в частности, в рамках программного комплекса MathLab & Simulink [3].

Данная работа посвящена комплексу программ, созданных на базе вероятностных клеточных автоматов (КА) [4]. Разработанные ранее авторами имитационные модели [4-6] модели имитируют атмосферные процессы (диффузию, седиментацию, ветровой массоперенос, вторичный массоперенос и др.). В рамках парадигмы КА данные математические модели описываются правилами КА [7]. Комплекс позволяет задавать форму источников загрязнения (точечный, линейный, площадной), их мощность, произвольные начальные и граничные условия (замкнутые, открытые) и др. параметры. В соответствии с парадигмой КА, моделирование производится на дискретной матрице пространства, временная ось разбита на равные промежутки времени – итерации [5, 6]. Результатом моделирования является матрица состояний клеточного автомата, ее аналогом можно считать сеточную функцию, получаемую при решении методом конечных разностей ДУ в частных производных [9]. Одной из отличительных особенностей метода клеточных автоматов является простота распараллеливания алгоритма за счет ограниченного числа участвующих в расчетах соседствующих клеток, называемых окрестностью. Функционал комплекса расширяется при добавлении

новых правил КА за счет модульности, см. табл. 1, рис. 1. В блоке «настройка эксперимента» указываются начальные и граничные условия, набор используемых правил, настройка входных параметров каждого правила, количество экспериментов, количество итераций, размерность матрицы состояний и др. параметры. Особенностью имитационного

моделирования и, в частности, метода вероятностных КА, является невозможность предсказать результат расчета без проведения компьютерного эксперимента. Точный результат моделирования изменяется от эксперимента к эксперименту, воспроизводятся его статистические характеристики.

Таблица 1. Структура программного комплекса имитационного моделирования

Модуль настройки компьютерного эксперимента		
Пространства	Правила	Модули
поверхность атмосфера концентрация	эмиссия ветровой массоперенос седиментация диффузия вторичный массоперенос	модуль представления модуль расчета статистических данных
Справочник доступных окрестностей		

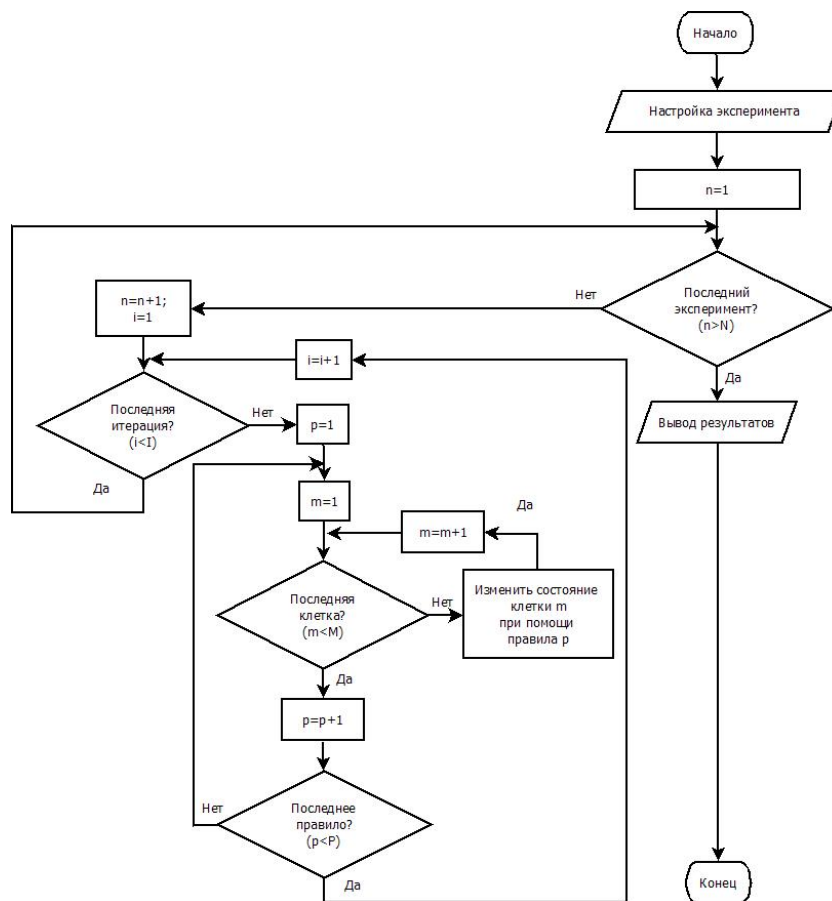


Рис. 1. Блок схема работы программного комплекса

Структура комплекса программ. Комплекс программ состоит из набора модулей (программ), по отдельности обеспечивающих расчеты массопереноса в результате моделирования следующих физических процессов:

- эмиссия загрязняющих веществ;

- ветровой массоперенос загрязняющих веществ;
- седиментация (гравитационное осаждение, сухое осаждение);
- турбулентная диффузия;
- вторичный ветровой массоперенос;

- адсорбция молекул воды на поверхности аэрозольных частиц.
 Математическое описание данных моделей и соответствующих им правила КА представлены в работах [4-6].

Проведем верификацию результатов имитационного расчета по отдельным программам (моделям) комплекса проведем путем сравнения с результатами расчета по аналитическим моделям, описывающим процессы массопереноса. В качестве основной математической модели выступает уравнение турбулентной диффузии для приземного слоя воздуха. Для упрощения расчетов традиционно принимается независимость коэффициентов турбулентной диффузии от координат [8].

$$\frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} - \omega \frac{\partial s}{\partial z} = k_x \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 s}{\partial z^2} + f_s(x, y, z, t) \quad (1)$$

Модель распространения загрязнения под действием сухого осаждения и ветрового массопереноса. Аналитическая модель.

Уравнение (1) для одного процесса примет следующий вид:
 - для седиментации

$$\frac{\partial s}{\partial t} - \omega \frac{\partial s}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

для ветрового массопереноса

$$\frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

Начальные условия двух моделей одинаковы:

$$s(x, y, z, 0) = f(x, y, z) = s_0(x, y, z) \quad (4)$$

Решение уравнений (2) и (3) представляет собой функцию движения облака начального распределения вещества вдоль одной из заданной оси:

- для седиментации движение вдоль оси z по закону $z(t) = z_0 - \omega t$,
- для ветрового массопереноса движение вдоль оси x по закону $x(t) = x_0 + ut$

Таблица 2. Параметры компьютерного эксперимента и аналитических моделей для процессов седиментации и ветрового массопереноса

Параметр	Аналитическая модель	Имитационная модель
начальные условия	$s_0(x) = \begin{cases} 1, x = x_0 \\ 0, x \neq x_0 \end{cases}, x_0 = 50, \text{м}$	$\{S(m_c, 0)\} = \begin{cases} C_0, m_c = x_0 \\ 0, m_c \neq x_0 \end{cases}$
средняя скорость седиментации	$\omega = 0.1, \text{ м/с}$	0.1, кл*/итер**
средняя скорость ветра	$u = 0.5, \text{ м/с}$	0.5, кл*/итер**
размерность матрицы	-	100x1x1, кл*
количество итераций	-	200, итер**
размер клетки	-	1, м
длительность итерации	-	1, с

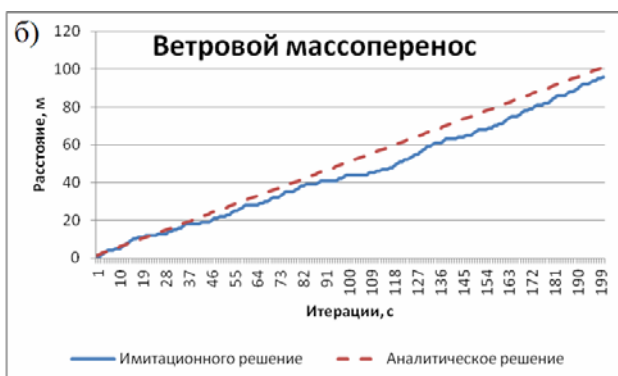
Примечание: *кл – клетка (ячейка матрицы), ** итер – итерация

Имитационная модель. Соответствующие имитационные модели реализованы в отдельных программах комплекса. В основе работы одной модели лежит правило соответствующее седиментации, в другой – правило ветрового массопереноса [4].

Модель распространения загрязнения под действием диффузии. Аналитическая модель. Рассмотрим одномерную диффузию без учета гравитационного осаждения и ветрового массопереноса, при действии мгновенного источника загрязнения, уравнение (1) имеет вид:

$$\frac{\partial s}{\partial t} = k_x \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} \quad (5)$$





Начальные условия $s(x,0) = \delta(x - x_0)$. Для постоянных коэффициентов турбулентной диффузии $k_i = const$, решение уравнения (5) имеет вид:

$$s(x,t) = \frac{1}{(4\pi k_x t)^{1/2}} \left[e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4k_x t}} \right] \quad (6)$$

Имитационное моделирование

Рис. 2. Результаты расчетов по аналитическим и имитационным моделям:

- а) распространение загрязнений под действием седиментации.
- б) распространение загрязнений под действием процесса ветрового массопереноса

Таблица 3. Параметры имитационной и аналитической модели для турбулентной диффузии

Параметр	Аналитическая модель	Имитационная модель
начальные условия	$s_0(x) = \begin{cases} 1, x = x_0 \\ 0, x \neq x_0 \end{cases}$, $x_0 = 100$,м	$\{S(m_c,0)\} = \begin{cases} 1, m_c = x_0 \\ 0, m_c \neq x_0 \end{cases}$, $x_0 = 100$ кл
коэффициент диффузии	$k_x = 3.5$,м ² /с	-
размерность матрицы	-	200x1x1, кл
размер клетки	-	1, м
длительность итерации	-	0.1, с
количество экспериментов	-	2000
окрестность диффузии	-	$N(m_{ij}) = \{m_{kl} \in M \& i - k \leq 0\}$

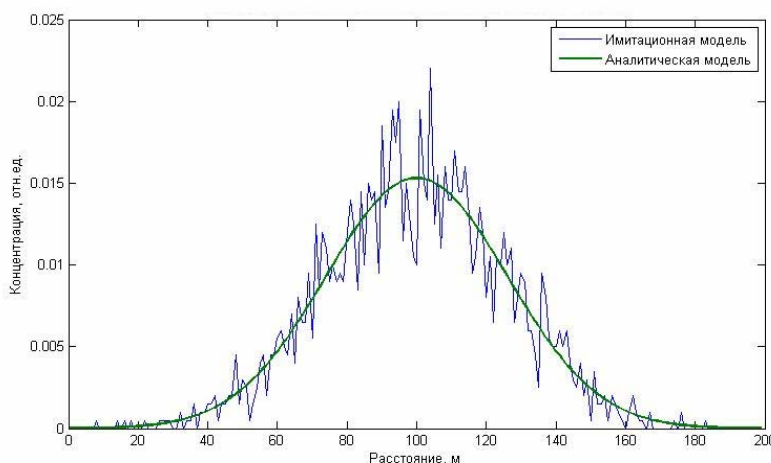


Рис. 3. Результаты расчетов по аналитической и имитационной модели распространения загрязнения под действием диффузии (1000 итераций, усреднение по 2000 экспериментов)

Выводы: разработанный комплекс программ имитационных моделей позволяет рассчитывать поля поверхностных загрязнений, сформированных под действием различных процессов (ветровой массоперенос, седи-

ментация и диффузия). В работе показано, что расчеты, выполненные с помощью имитационных и аналитических моделей, согласуются. Особенностью результатов расчетов является гладкая (усредненная) зависимость концентрации

загрязняющих веществ, как от времени, так и от расстояния до источника, что не подтверждается при проведении натурного эксперимента [10]. С другой стороны результаты, полученные с помощью имитационных моделей, имеют зашумленный вид вследствие стохастической природы правил массопереноса КА, что лучше соответствует реальным данным. Разработанный программный комплекс позволяет моделировать процессы ветрового массопереноса веществ, процессы адсорбции молекул воды на поверхности аэрозольной частицы [5, 11], процессы вторичного ветрового массопереноса [6], процессы турбулентной диффузии и седиментации, учитывать суперпозицию источников загрязнений различной формы и также влияние сложных граничных условий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

- List of atmospheric dispersion models. – URL: http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_atmospheric_dispersion_models
- Перечень методик, для расчета, нормирования и контроля выбросов. Введен Минприроды России. Письмо № 12-45/709 от 25.01.2010 г.
- Kenneth, R.D. Modeling in MATLAB and Simulink. Press. 2011. P. 270.
- Губарев, С.В. Имитационный подход к решению задач распространения примесей / С.В. Губарев, Д.Б. Берг, А.П. Сергеев // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2010. Т.12. С. 2112-2115.
- Губарев, С.В. Имитационное моделирование распределения двухфазных загрязнений атмосферы / С.В. Губарев, К.А. Беклемишев, Д.Б. Берг // Материалы Международной молодежной научной конференции. Ереван. 2007. С. 22-27.
- Губарев, С.В. Две модели для исследования ветрового вторичного массопереноса / С.В. Губарев, К.А. Беклемишев, Д.Б. Берг // Сб. науч. тр. «Информационно-математические технологии в экономике, технике и образовании». – Екатеринбург: изд. УГТУ-УПИ, 2008. С. 196-201.
- Тоффоли, Т. Машины клеточных автоматов / Т. Тоффоли, Н. Марголус. – М.: Мир, 1991. 280 с.
- Годунов, С.К. Разностные схемы / С.К. Годунов, В.С. Рябенский. – М.: Наука, 1977. 440 с.
- Монин, А.С. Атмосферная диффузия // Успехи физических наук. 1959. Т. LVII, вып. 1. С. 119-130.
- Чуканов, В.Н. Диагностика загрязнений снегового покрова растворимыми и нерастворимыми формами металлов / В.Н. Чуканов, А.П. Сергеев, С.М. Овчинников, А.Н. Медведев // Дефектоскопия. 2006. №9. С. 91-98.
- Овчинников, С.М. Влияние растворимости загрязнителя на его распределение вокруг промышленного предприятия: натуральный эксперимент и компьютерная модель / С.М. Овчинников, К.А. Беклемишев, В.Н. Чуканов и др. // Экология промышленного производства. 2008. № 1. С. 54-55.

SOFTWARE SYSTEM FOR CALCULATION THE DISTRIBUTION OF POLLUTION BY CELLULAR AUTOMATIC MACHINES METHOD

© 2011 S.V. Gubarev², D.B. Berg^{1,2,3}, A.P. Sergeev¹

¹ Institute of Industrial Ecology UrB RAS, Ekaterinburg

² Ural Federal University, Ekaterinburg

³ Alexander Bogdanov's International Institute, Ekaterinburg

Article is devoted to software system for calculation the mass transfer of polluting substances in atmosphere by a method of imitating modeling in the computing environment of cellular automatic machines. The general scheme of work of a complex is presented. Comparison of results of calculations on imitating models with analytical decisions of the equation of turbulent diffusion in various approximations is resulted.

Key words: *imitating modeling, cellular automatic machines, mass transfer processes*

Semyon Gubarev, Post-graduate Student. E-mail: mnogono@gmail.com

Dmitry Berg, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Senior Research Fellow. E-mail: bergd@mail.ru

Alexander Sergeev, Candidate of Physics and Mathematics, Chief of the Laboratory, Senior Research Fellow. E-mail: sergeev@ecko.uran.ru