

Секция 7. Теоретико-игровые модели в экологии

Математическое и компьютерное моделирование процессов вторичного массопереноса загрязнений: метод функции Грина и метод клеточных автоматов

С. В. Губарев, К. А. Беклемишев, Д. Б. Берг
Институт промышленной экологии УрО РАН
Уральский Государственный Технический Университет — УПИ
Международный Институт Александра Богданова
г. Екатеринбург, Россия
e-mail: senya_86@inbox.ru

Введение

Вторичный массоперенос загрязняющих веществ оказывает существенное влияние на формирование полей поверхностных загрязнений: размывает границу и изменяет форму последних, концентрирует загрязнения на одних участках загрязненной территории, одновременно снижая концентрацию вредных веществ на других. Действие вторичного массопереноса может длиться годами и быть локальным (например, диффузия загрязнений в поверхностном слое почвы), но может быть достаточно кратковременным и сравнимым по масштабу с территорией первичного загрязнений (ветровой перенос).

Традиционно математические модели ветрового переноса записываются на языке дифференциальных уравнений [1]. При всем удобстве использования развитого аппарата для их решения, на этапе постановки задачи (составления уравнения или их системы) часто встречаются существенные трудности, связанные с необходимостью учета нетривиальных граничных условий (например, сложного неоднородного рельефа подстилающей поверхности), действия сопутствующих массопереносу процессов (например, конденсация водяных паров на частицах пыли) и других факторов.

В то же время, существует альтернативный дифференциальным уравнениям путь моделирования сложных физических процессов — имитационные модели в вычислительной среде клеточных автоматов (КА) [4]. Модели КА хорошо зарекомендовали себя в различных физических приложениях [2] и позволяют относительно легко учесть все многообразие условий, в которых осуществляется вторичный ветровой массоперенос.

Целью данной работы является краткое описание обеих моделей и качественное сравнение результатов расчетов по ним.

Ветровой вторичный массоперенос

Как известно, твердая частица под действием ветра может скользить, катиться и отрываться от поверхности. Катящиеся и скользящие частицы, взаимодействующие с шероховатостью поверхности, в итоге могут оказаться в приповерхностном возмущенном ветровом поле, откуда, под действием случайных ветровых флуктуаций могут подняться еще выше и попасть в область, где основной вклад в перенос частиц вносит ветровой перенос. Частицы «большой» массы не могут высоко подняться над поверхностью, тогда они испытывают сальтационные движения. Доказано, что сальтационные процессы являются доминирующими при песчаных бурях, под действием этого процесса переносится до 75% всех частиц.

Аналитическая модель

В большинстве моделей распространения примесей лежит нестационарное уравнение турбулентной диффузии, так называемая К-теория. По повторяющемуся индексу подразумевается суммирование [5]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = K_i \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} - v_i \frac{\partial C}{\partial x_i}, \quad (28)$$

где предполагается, что коэффициенты турбулентной диффузии K_i не зависят от координат, v_i скорость ветра. Вторичный массоперенос можно описать как работу мгновенного точечного источника загрязнений. Используя функцию Грина [1], можно получить решение в виде:

$$C(x_1, x_2, x_3, t) = Q \cdot G(x_1, x_2, x_3, t), \quad (29)$$

где Q — общая масса примесей, выброшенная источником, ед. массы.

Для одномерного случая функция Грина выглядит следующим образом:

$$G(x_1, t) = \frac{\exp(-(x_1 - x_1^0) - v_1 t)^2}{4K_1 t} / (2\sqrt{\pi K_1 t}). \quad (30)$$

По данным формулам можно рассчитать значения концентрации загрязняющего вещества в каждой точке пространства в любой момент времени t в рассматриваемом простейшем случае.

Имитационная КА-модель

Модель реализована на квадратной решетке, клетки $X_{i,j}$ которой находятся в определённом состоянии [3, 4] (F — частица, витающая в воздухе, F' — частица, находящаяся на поверхности, E — воздушная среда), которое меняется на каждом временном шаге $X_{i,j}(t) \rightarrow X_{i,j}(t+1)$, в соответствии правилом клеточного автомата. $M_{i,j} = \{X_{i-1,j+1}; X_{i-1,j}; X_{i-1,j-1}; X_{i,j+1}; X_{i,j-1}; X_{i+1,j+1}; X_{i+1,j}; X_{i+1,j-1}\}$ (окрестность Мура).

Правила функционирования модели

Правило 1. Захват частиц потоком воздуха с подстилающей поверхности: $X_{i,j}(t) \in F' \rightarrow |X_{i,j}(t+1) \in F$, с вероятностью p_{st} , где $p_{st}(R_{i,j}, V_{i,j}, m)$ — вероятность зависящая от шероховатости R в данной точке пространства (i, j) , скорости ветра V и массы частицы m .

Правило 2. Ветровой массоперенос:

$X_{i,j}(t) \in E \rightarrow |X_{i,j}(t+1) \in F$ с вероятностью $p_F^V(\vec{V})$, если $\{M_{i,j} \cap F \neq \emptyset\}$; значения упомянутых выше вероятностей зависят от направления и скорости ветра.

Правило 3. Выпадение:

$X_{i,j}(t) \in F \rightarrow |X_{i,j}(t+1) \in F'$ с вероятностью p'_F (зависящей от массы частицы)

Для компьютерных расчетов данные правила кодируются в универсальной лаборатории PyCALab, написанной на языке python [3].

Правило 4. Турбулентная диффузия:

$X_{i,j}(t) \in E \rightarrow |X_{i,j}(t+1) \in F$ с вероятностью p , если $\{M_{i,j} \cap F \neq \emptyset\}$;

Заключение

В данной работе дано краткое описание двух моделей одного и того же процесса, влияющего на перераспределение загрязняющих веществ после их выпадения на подстилающую поверхность — вторичного массопереноса. Особенностью аналитической модели является гладкая (усредненная) зависимость концентрации частиц от времени и возможные трудности при учете комплексного влияния различных условий на процесс вторичного массопереноса. Особенностью второй — имитационной модели в вычислительной среде клеточных автоматов — является относительная простота введения в модель практически любых граничных, начальных условий и сопутствующих ветровому массопереносу факторов, а также зашумленный вид искомой зависимости значения концентрации частиц в определенной точке поверхности от времени вследствие случайного характера массопереноса в каждой конкретной реализации (расчетном компьютерном эксперименте). Качественное согласие результатов расчетов по обеим моделям позволяет комбинировать их использование при исследовании вторичного ветрового массопереноса загрязняющих веществ в зависимости от особенностей возникающих задач.

Литература

1. Филишов И. Г., Потапов Д. В., Горский В. Г., Чужин В. А. *Моделирование распространения примеси от стационарного источника сложной формы*, Рос. хим. журн. т. **39**, № **2** (1995).
2. Тоффоли Т., Марголюс Н. *Машины клеточных автоматов*, М.: Мир, 1991.
3. Беклемишев К.А. *Универсальная лаборатория клеточных автоматов PyCALab*, Вестник УГТУ-УПИ **6** (2006), 117–122.
4. *Симулятор процессов поверхностного распространения загрязнений*, Свидетельство Роспатента на Программу для ЭВМ №2005612986, 21.11.2005, Авторы: Беклемишев К. А., Сергеев А. П., Медведева М. А., Берг Д. Б.
5. *Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей*, Под ред. Ф. Т. М. Ньистадта, Х. Ван Допа. пер. с англ. Л.: Гидрометеоздат, 1985.