

УДК 004.942 (504.054)

В.С. Бабков, Т.Ю. Ткаченко  
Донецкий национальный технический университет  
victor.babkov@gmail.com, senyorita999@yandex.ru

## Анализ математических моделей распространения примесей от точечных источников

*В работе проанализированы математические модели загрязнения атмосферного воздуха, а также существующие программные реализации для моделей распространения примесей. В результате исследования установлено, что построение единой классификации моделей распространения примесей от точечных источников представляет трудноразрешимую задачу в виду многогранности и многоаспектности подходов к моделированию. В работе предпринята попытка упорядочить множественные подходы к решению данной задачи.*

**Ключевые слова:** модель, точечный источник, примесь, вычислительная гидродинамика, турбулентность, диффузия

### Введение

Проблема охраны окружающей среды и ее восстановления становится одной из важнейших задач науки, развитие которой стимулируется все возрастающими темпами технического прогресса во всех странах мира. Стремительное развитие промышленности способствовало появлению перед человечеством острой проблемы – сохранение экологических систем, которые исторически сформировались на нашей планете. В последние десятилетия экологические системы испытывают значительное влияние природных и, в особенности, антропогенных факторов, изменяясь в нежелательном для человечества направлении. [1]

Для большинства крупных городов характерно чрезвычайно сильное и интенсивное загрязнение атмосферы. По большому числу загрязняющих агентов, а их в городах насчитывается сотни, можно с уверенностью сказать, что они, как правило, превышают предельно допустимые концентрации. Более того, поскольку в городах наблюдается одновременное воздействие множества загрязняющих агентов, их совместное действие может оказаться еще более значительным.

Масштабы техногенных процессов, обуславливают большие объемы рассеивания многих химических элементов и вызывают накопления в окружающей среде соединений в несвойственных природе сочетаниях.

Таким образом, загрязнение воздушного бассейна становится реальным препятствием научно-технического прогресса в городах, действие которого будет постоянно усиливаться по мере повышения требований к чистоте технологий, росту точности промышленного оборудования [13].

Загрязнение атмосферного воздуха является одной из самых серьезных

экологических проблем многих промышленных городов мира. Повышенная концентрация загрязняющих веществ наблюдается в атмосфере практически каждого промышленного города, поэтому возникает необходимость в решении задачи оценки и моделирования распространения загрязняющих частиц в атмосфере именно от точечных стационарных источников с целью предотвращения или уменьшения их воздействия на экосистему.

При анализе процессов загрязнения атмосферы городов весьма существенно различие между загрязнениями, производимыми стационарными и мобильными источниками.

Точечным стационарным источником загрязнения является источник, сосредоточенный в определенном месте и выбрасывающий загрязняющие атмосферу вещества из установленного отверстия. Для городов точечными стационарными источниками загрязняющими атмосферу являются дымовые трубы заводов, теплоэлектростанций, отопительных котельных, технологических установок, печей и сушилок, вытяжные шахты, дефлекторы, вентиляционные трубы, вытяжки, шахты и так далее.

Стационарные источники выбрасывают в воздух главным образом сернистый газ, окислы азота, а также некоторое количество угарного газа, фенолов, серной кислоты и других загрязняющих веществ в зависимости от специфики промышленного производства города и состава используемого в нем топлива. Относительно недавно стационарные источники выбрасывали в атмосферу значительное количество пыли разнообразного химического состава, но в настоящее время существующие газоочистные установки задерживают более 95% всех твердых частиц, образующихся при сгорании топлива, но практически не улавливают газовых составляющих [14].

Другой особенностью стационарных источников является то, что их сбросы в атмосферу, в отличие от мобильных источников, происходят, как правило, на большой высоте, что приводит к тому, что производимые ими загрязнения распространяются на большой территории (в зависимости от высоты труб). Эти зоны, накладываясь друг на друга, образуют области устойчивых загрязнений в промышленных районах городов, распространяющихся на высоту до 150 м и более.

Газообразные выбросы промышленных предприятий образуют в атмосферном воздухе аэродисперсные системы и в результате турбулентного движения и других процессов долгое время удерживаются в воздухе. Дальность распространения загрязнителей зависит от времени существования того или иного загрязнителя в воздухе и метеорологических условий, скорости и направления потоков в атмосфере, осадков и других процессов.

В отличие от стационарных источников загрязнение воздушного бассейна автотранспортом происходит на небольшой высоте и практически всегда имеет локальный характер.

Самыми распространенными вредными веществами, загрязняющими атмосферный воздух, являются: оксид углерода, диоксид серы, сажа, оксиды и диоксиды азота, аммиак, фенол, формальдегид, фтористый водород и неорганическая пыль.

Для получения достоверной экологической информации о состоянии атмосферного воздуха используются различные методы анализа состояния окружающей среды.

### **Методы анализа состояния окружающей среды**

Анализ осуществляется путем решения следующих задач.

#### **Задача мониторинга**

Мониторингом окружающей среды называются регулярные наблюдения природных сред, природных ресурсов, растительного и животного мира, позволяющие выделить их состояния и происходящие в них процессы под влиянием антропогенной деятельности.

В систему мониторинга должны входить следующие основные процедуры:

- выделение (определение) объекта наблюдения;
- обследование выделенного объекта наблюдения;
- составление информационной модели для объекта наблюдения;
- планирование наблюдений;
- оценка состояния объекта наблюдения и идентификация его информационной модели;

- прогнозирование изменения состояния объекта наблюдения;

- представление информации в удобной для использования форме и доведения ее до потребителя.

Основные задачи экологического мониторинга:

- наблюдение за источником антропогенного воздействия;
- наблюдение за фактором антропогенного воздействия;
- наблюдение за состоянием природной среды под влиянием факторов антропогенного воздействия и оценка прогнозируемого состояния природной среды.

Классификация видов мониторинга может быть представлена в следующем виде [15].

1. Мониторинг источников воздействия и отходов. Сбросы, выбросы, размещение и удаление отходов, использование ресурсов и готовой продукции.

2. Мониторинг факторов воздействия. Физические, химические, биологические факторы воздействия.

3. Мониторинг состояния биосферы. Географический мониторинг (атмосфера, океан, поверхность суши с реками и озерами) и биологический мониторинг.

#### **Задача прогнозирования**

Для прогноза качества воздуха используется большое разнообразие методик – от простейших до комплексных. На данный момент большинство из них направлены на проведение краткосрочного – от 1 до 3 дней – прогнозирования концентрации загрязняющих веществ. Методики прогнозирования загрязнения делятся на три большие категории.

**Климатологические.** Использование климатологии для прогнозирования качества воздуха базируется на предположении, что прошлое хорошо предсказывает будущее. Этот подход основан на взаимосвязи повышенных уровней загрязнения с определенными метеорологическими условиями. Приложение для прогнозирования качества воздуха может быть настолько же простым, насколько просто предположение о постоянстве (то есть, если уровни загрязнения будут высоки сегодня, то они также будут высоки завтра), или может включать разработку сложных типовых синоптических условий (то есть, идентифицируя повторяющиеся метеорологические модели, связанные с высокими уровнями загрязнения). Эти подходы обычно используются для прогнозирования превышения предельных концентраций веществ в окружающей среде. Преимущество данных подходов в том, что они достаточно простые и недорогие в применении.

**Статистические методы.** Взаимосвязь между определенными метеорологическими параметрами и состоянием воздуха может быть определена количественно, используя множество статистических методик. Для прогнозирования они фактически являются наиболее общими. Всего идентифицируют три используемых статистических подхода.

**Классификации и дерево регресса (CART).** Эта методика основана на использовании специализированного программного обеспечения для идентификации тех переменных (метеорологических или отражающих состояние воздуха), которые наиболее тесно связаны с уровнями загрязнения окружающей среды. Далее эти переменные используются для предсказания будущих уровней загрязнения, используя данные о текущем состоянии воздуха и прогноза погоды.

**Регрессионный анализ.** Взаимосвязь между уровнем загрязнения и метеорологическими и аэрометрическими переменными может быть определена количественно с помощью анализа наборов ретроспективных данных, используя стандартные статистические пакеты анализа. Результирующее множественное линейное уравнение регресса может использоваться для прогнозирования уровней загрязнения.

**Искусственные нейронные сети.** Еще один метод анализа ретроспективных данных, состоящий в том, чтобы идентифицировать атмосферные параметры, которые влияют на качество воздуха и количественно оценить это влияние с помощью приложений, использующих такой метод адаптивного обучения и распознавания образов, как нейронные сети. Нейронные сети основаны на имитации процесса распознавания повторяющихся образов, который присущ человеческому мозгу. Были разработаны нейросети, которые идентифицируют синоптические условия, связанные с повышением уровня концентрации озона. Вероятно, такая же методика может быть применима и к другим загрязняющим веществам.

Данные подходы являются более сложными, чем климатические, но при этом они достаточно просты в реализации и использовании, требуют небольших вычислительных ресурсов и незначительных специальных знаний.

**Трехмерные (3-D) модели.** Хотя методики, описанные выше, имеют много преимуществ, у них есть один общий недостаток. Они предполагают некоторую стабильность процессов, определяющих состояние воздуха. Любые климатические изменения (краткосрочное или долгосрочное) либо изменение количества выбросов снижают эффективность этих методик. Один из путей решения данной проблемы состоит в том, чтобы использовать более детерминированный подход в прогнозировании

качества воздуха. Детерминированные 3-D модели состояния воздуха стремятся математически представить все важнейшие процессы, влияющие на уровень загрязнения окружающей среды. Эти модели фактически состоят из нескольких подмоделей, которые взаимодействуют при моделировании выброса, переноса и преобразования загрязнения воздуха. Примеры таких подмоделей следующие.

**Модели выбросов.** Моделируют во времени пространственное распределение выбросов примеси загрязняющего вещества, и/или (в случае вторичных загрязнителей, таких) предшествующих выбросов, вызванные антропогенными или естественными источниками.

**Метеорологические модели.** Прогнозируют метеорологические условия, влияние химических факторов (солнечной активности, температуры, влажности, и т.д.), излучений (например, температура), и осадков, которые определяют перенос и смешивание загрязняющих веществ. Модели траекторий используют 3-D метеорологию данных моделей в сочетании с данными о выбросах для предсказания уровней таких неактивных загрязнителей окружающей среды, как пыль и дым.

**Химические модели.** Эти модели используют уровни основных параметров химической кинетики, спектроскопические свойства и термодинамические соотношения для моделирования преобразования первичного (испускаемого) загрязнения во вторичное загрязнение, учитывая свойства композиции и морфологию (измеряемые дистрибутивные и оптические свойства) аэрозолей. [16]

В зависимости от метода, используемого для моделирования распределения концентрации загрязнения с течением времени трехмерные модели качества воздуха делятся на ряд моделей, использующих математические алгоритмы.

**Алгоритм Гауссовой модели.** Алгоритм Гауссовой модели является наиболее распространенным в моделировании анализа воздушной дисперсии. Он основан на предположении, что загрязнитель будет расходиться в соответствии с нормальным распределением статистики. Общее Гауссовское уравнение [2]:

$$\frac{dC}{dt} + U \frac{dC}{dx} = \frac{d}{dy} \left( K_y \frac{dC}{dy} \right) + \left( K_z \frac{dC}{dz} \right) + S,$$

где:

x - измеренная координата от источника вдоль направления ветра;

$y$  - измеренная координата от источника перпендикулярно направлению ветра;

$z$  - вертикальная координата, отсчитываемая от почвы;

$C(x, y, z)$  - средняя концентрация дисперсного вещества при  $(x, y, z)$  точки;

$K_y, K_z$  - распространение турбулентности по направлениям осей  $y$  и  $z$ ;

$U$  - средняя скорость ветра вдоль оси  $x$ .

При реализации модели могут быть сделаны некоторые упрощения:

- концентрации загрязняющих веществ не влияют на разреженный поток (пассивная дисперсия);

- молекулярная диффузия и продольная диффузия (вдоль направления ветра) незначительны;

- турбулентные потоки являются линейными;

- боковая средняя скорость,  $V$  и вертикальная скорость ветра  $W$  равны нулю, идеальный случай плоской поверхности.

На основании этих гипотез, можно перейти к следующей формуле:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi x \sqrt{K_y \frac{x}{U}} \sqrt{K_z \frac{x}{U}}} \exp\left(-\frac{y^2}{4K_y \frac{x}{U}}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{4K_z \frac{x}{U}}\right)$$

Полагая

$$\sigma_y = \sqrt{2K_y \frac{x}{U}} \text{ и } \sigma_z = \sqrt{2K_z \frac{x}{U}}$$

и вводя оригинальные выражения, получим:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[ \exp\left(-\frac{(x - x_p)^2}{2\sigma_x^2}\right) + \exp\left(-\frac{(x + x_p)^2}{2\sigma_x^2}\right) \right]$$

Использование данного уравнения требует учета некоторых предположений:

-выброс должен быть постоянным и равномерным;

-направление ветра и дисперсии являются постоянными;

-диффузия по направлению ветра является незначительной по сравнению с вертикальной диффузией и нормальным направлением по направлению ветра;

- земля относительно плоская, не имеющая нормальных ограничений на направление ветра;

- нет осадка или поглощения загрязняющего вещества;

- диффузия по вертикали или по нормали в направлении ветра следует гауссовскому распределению;

- форма облака рассматривается расширенной;

- использование среднеквадратичного отклонения  $\sigma_y$  и  $\sigma_z$  полагает, что турбулентность облака должна быть однородной по всему объему.

Гауссовская модель чаще всего используются для прогнозирования дисперсии непрерывных, плавучих выбросов загрязнения воздуха начинающихся от уровня земли или наземных источников. Гауссовская модель может также быть использована для прогнозирования дисперсии прерывистых выбросов загрязнения воздуха (так называемые слоеные модели). [6]

**Алгоритм модели Эйлера.** Модель Эйлера решает уравнение сохранения массы для данного загрязнителя.

Общее уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial(cU)}{\partial t} = -\bar{U} \nabla(c_0) - \nabla(c_0 U) + D \nabla^2 \langle c_0 \rangle + \langle S_0 \rangle,$$

$$U = \bar{U} + U',$$

где:

$U$  - главный вектор ветра  $U(x, y, z)$ ;

$\bar{U}$  - средний вектор области ветра;

$U'$  - вектор колебаний области ветра;

$C$  - концентрация загрязняющего вещества;

$\langle c \rangle$  - средняя концентрация загрязняющего вещества;

$c'$  - концентрация загрязняющего вещества в колебании;

$D$  - молекулярный коэффициент диффузии;

$S_0$  - начальный элемент.

Модели Эйлера используют фиксированную решетку (вертикальную и горизонтальную) и решают соответствующие химические уравнения одновременно во всех ячейках решетки, при этом учитывая обмен загрязняющими веществами между ячейками. Обычно количество вычислений снижают с помощью использования вложенных архитектур: в сельских районах, где концентрации веществ достаточно гомогенны, применяются архитектуры более низкого качества – «грубые», на территории городов, где наблюдаются явные градиенты концентраций веществ, используют более высококачественные архитектуры.

**Алгоритм модели Лагранжа.** Алгоритм модели Лагранжа предсказывает дисперсию загрязняющего вещества, зная изменение базовой решетки. Это изменение базовой решетки в целом зависит от того, что направление ветра или вектор поля ветра попадает на направление

загрязняющего облака. Модель Лагранжа может быть представлена следующим образом [7]:

$$\langle c(r, t) \rangle \geq \iint p(r', t|r'', t') S(r', t') dr' dt',$$

где:

$\langle c(r, t) \rangle$  - является средней концентрацией загрязняющего вещества в месте  $r$  и времени  $t$ ;

$S(r', t')$  - определяет источник выброса;

$p(r, t|r', t')$  - функция вероятности перехода от места  $r'$  и времени  $t'$  к месту  $r$  и времени  $t$ .

Вероятностная функция должна быть определена как функция полных метеорологических данных, близких к источникам газа. Если источник выбросов включает в себя механическую пыль, частицы, то это должно быть добавлено в качестве распределения меры и плотности частиц. Модель Лагранжа описывает перенос отдельных воздушных потоков с течением времени под действием атмосферных полей и распространение примесей загрязняющего вещества. Этот подход дает эффективную в вычислительном плане систему. Однако трудно должным образом характеризовать взаимодействие большого количества отдельных источников загрязнения, требующее использование нелинейной химии.

**Алгоритм модели Ханна.** Данная модель основана на формуле для оценки самой высокой концентрации загрязняющего вещества испускаемого от точечного источника по направлению ветра [8]:

$$C_{wc} = \frac{10^3 Q}{UH_{wc} W_{wc}},$$

где:

$Q$  - скорость выброса газа или частицы/ порошка;

$C_{wc}$  - наибольшая концентрация;

$U$  - наиболее опасные скорости ветра;

$W_{wc}$  - наибольшая широта загрязняющего облака;

$H_{wc}$  - наибольшая глубина загрязняющего облака.

**Алгоритм Вох – модели.** Алгоритм Вох – модели является наиболее простым из. Он рассматривает осадок воздуха имеющего форму коробки. Считается, что воздух внутри коробки имеет однородную концентрацию. Алгоритм вох-модели может быть представлен следующим уравнением [9]:

$$\frac{dcv}{dt} = QA + uC_{in} WH - uCWH,$$

где:

$Q$  - связь выбросов загрязняющих веществ на единицу поверхности;

$C$  - концентрация однородных типов внутри осадка;

$V$  – объем, описанный коробкой;

$C_{in}$  - концентрация вида загрязнения, который попадает в осадок;

$A$  – горизонтальная поверхность коробки ( $L \times W$ );

$L$  – длина коробки;

$W$  – ширина коробки;

$u$  - скорость ветра, действующая перпендикулярно на коробку;

$H$  - высота перемешивания.

**Алгоритм стохастической модели,** базируется на полуэмпирических или статистических методах и ориентирован на проведение анализа соотношения между качеством атмосферного воздуха и измерениями атмосферных параметров или на прогнозировании случаев повышенного загрязнения воздуха.

**Алгоритм рецепторной модели** рассматривает измеренные концентрации загрязнителей в рецепторной точке и оценивает процентный вклад различных источников в эту концентрацию. [10]

В свою очередь, некоторые из представленных алгоритмов составляют основу двух больших классов моделирования качества воздуха.

### Классификация моделей загрязнения атмосферного воздуха

По данным из [11] для моделирования качества атмосферного воздуха применяются модели распространения примесей в атмосфере которые подразделяются на 2 соответствующих класса:

- модели рассеивания примесей в атмосфере;

- модели загрязнения атмосферного воздуха.

Модели рассеивания атмосферных примесей могут быть использованы в самых различных целях:

- определение соотношений источник – рецептор;

- определение вклада различных источников в суммарные концентрации;

- оценка пространственного распределения концентрации и экспозиции населения;

- оптимизация стратегий снижения объема выбросов и анализ сценариев, связанных с выбросами;

- прогнозирование изменения концентраций загрязнителей во времени;

- анализ репрезентативности станций мониторинга; и использование моделей как инструментов научных исследований.

Для применения моделей следует располагать метеорологической и географической

информацией, а также данными об источниках загрязнения и выбросах.

Модели рассеивания описывают процессы турбулентной диффузии в атмосфере и представляются следующей классификацией:

1. Эйлеровы модели, позволяющие численно решать уравнения атмосферной диффузии.

2. Гауссовы модели, в соответствии с которыми, распределение концентраций характеризуется как гауссовское в горизонтальном и вертикальном направлениях.

3. Лагранжевы модели, в которых либо отслеживаются процессы в движущихся массах воздуха, либо используются условные частицы для имитации процессов рассеивания;

К моделям загрязнения атмосферного воздуха также можно отнести полуэмпирические модели, базирующиеся, главным образом, на эмпирической параметризации; стохастические модели; рецепторные модели,

Из вышесказанного видно, что в основе моделей рассеивания лежат модели Эйлера, Лагранжа, Гаусса. Кроме того все модели построенные на основе рассмотренных уравнений классифицируются, соответственно, по масштабам атмосферных процессов, а именно:

- макромасштаб (масштаб протяженности  $> 1000$  км), при котором атмосферный поток ассоциируется с синоптическими явлениями;

- мезомасштаб ( $1$  км  $<$  масштаб протяженности  $< 1000$  км), при котором воздушный поток отчасти находится в зависимости от синоптических явлений и отчасти от гидродинамических эффектов (например, от шероховатости подстилающей поверхности и препятствий) и от неоднородностей энергетического баланса;

- микромасштаб (масштаб протяженности  $< 1$  км), при котором воздушный поток в основном зависит от характеристик поверхности.

С другой стороны, по данным из [12], классификацию моделей рассеивания можно представить и иным образом, разделив их на локальные (при масштабе времени менее нескольких минут), от локальных до региональных (несколько часов), от региональных до континентальных (несколько дней) и от континентальных до глобальных (недели или более).

Можно также сказать что рассматриваемые модели являются базисным математическим аппаратом, который применяется для построения математической стороны модели. Но в ходе анализа источника [17] было выяснено, что реальные спроектированные модели распространения различных загрязнителей в атмосфере представляют собой супермодели у которых за основу взят какой-либо из рассмотренных алгоритмов с различными

дополнениями в виде математических уравнений, описывающих турбулентность, осаждение и т.д.

Программная реализация таких математических моделей на практике представляет собой сложную систему, учитывающую различные факторы, такие как например: динамику турбулентных воздушных потоков; перенос тепла, пыли и реагирующих газообразных загрязнителей; перенос прямого солнечного и диффузного излучений; влияние излучения на тепловые процессы и фотохимические реакции; динамику водяного пара и капель; конденсацию и испарение; поглощение (и высвобождение) газообразных загрязнителей каплями. Необходимо также отметить, что сложные математические модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере проектируются под конкретную задачу и разрабатываются конкретными организациями или научно-исследовательскими институтами. Наиболее известными реализациями моделей рассеивания газов являются методика Всемирного банка, методики класса HGSYSTEM, методики, созданные такими организациями как TNO (Голландия), Det Norske Veritas (DNV Technica) (Норвегия), U. S. Environmental Protection Agency (EPA – агентство защиты окружающей среды США), NIST (Национальный институт стандартов и технологий США), методики класса DEGADIS. Разработанные методики реализуются в виде определенных программных продуктов.

Наиболее широко распространенными моделями, используемыми в США, Канаде, ЕС и других странах являются следующие модели.

#### **Модели AERMOD.**

Основными разработчиками прикладного программного обеспечения для этого класса моделей являются компании Lakes Environmental (Канада) и BREEZE (США). Модели AERMOD содержат три основных модуля: AERMOD (модель дисперсии примеси в атмосфере), AERMET и инструментальный набор AERSURFACE для создания входных данных связанных с состоянием атмосферы и рельефом местности, AERMAP – программные средства, предназначенные для привязки модели к трехмерным данным местного рельефа и объектов. Кроме того в моделях данного класса содержится ряд средств, позволяющих учитывать особенности распространения примеси над трассами, водными преградами, лесным массивом и т. д. Использование моделей этого класса связано с существенными затратами и усилиями при подготовке входных данных и имеет смысл при оценке экологических рисков от промышленных источников загрязнения.

### **Модели CALPUFF.**

CALPUFF является современной нестационарной метеорологической и воздушной системой моделирования качества воздуха, разработанной учеными ASG. Она поддерживается разработчиками модели и распространяется TRC. Модель была принята американским управлением по охране окружающей среды (EPA) как привилегированная модель для того, чтобы оценить дальний перенос загрязнителей и их воздействий на федеральные области. Система моделирования состоит из трех главных компонентов и ряда программ постобработки и предварительной обработки. Главные компоненты системы моделирования - CALMET (диагностическая 3-мерная метеорологическая модель), CALPUFF (модель дисперсии качества воздуха), и CALPOST (пакет постобработки). У каждой из этих программ есть графический интерфейс пользователя. В дополнение к этим компонентам есть многочисленные другие процессоры, которые могут использоваться, чтобы подготовить геофизические (землепользование и ландшафт) данные во многих стандартных форматах, метеорологические данные (поверхность, верхний воздух, осадение, и буйковые данные), и интерфейсы к другим моделям, таким как Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5).

**Модели ADMS3.** ADMS-3 является современной моделью дисперсии для вычисления концентрации загрязнителей, выпускаемых из точечных, линейных, объемных и площадных источников. Модель включает алгоритмы, которые принимают во внимание следующее: эффекты основного участка застройки; сложность местности; влажное осаждение, гравитационное осаждение и сухое осаждение; краткосрочные колебания в концентрации; химические реакции; радиоактивный распад и гамма доза; повышение факела как функции расстояния; потоки и направленные выбросы; усреднение времени в пределах от очень короткого к ежегодному.

**Модели CALINE3.** CALINE3 является стационарной гауссовской моделью дисперсии, разработанной для определения концентрации загрязнения воздуха в относительно несложной местности. CALINE3 включена в более усовершенствованные модели CAL3QHC и CAL3QHCR.

**Модели CTDMPLUS.** CTDMPLUS является усовершенствованным точечным источником гауссовской модели качества воздуха для использования в условиях сложного ландшафта.

**Модели OCD.** OCD является моделью, разработанной для определения воздействия эмиссии от точечных, площадных или линейных источников на качество воздуха в прибрежных районах.

На основании анализа источника [19] можно сделать вывод о том, что данные модели являются наиболее рекомендованными в различных странах для определения концентраций загрязняющих веществ в атмосфере. Рассмотренные модели в большей мере конкретизированы для определенных задач и ориентированы на однопроцессорные системы.

Также существует ряд и других моделей. Большой частью используются модели на основе распределения Гаусса (например, ADAM, ISC-3), реже модели на основе уравнений Эйлера и/или Навье-Стокса (Chensi, CAMx, PANACHE, REMSAD, WYNDVALLEY).

Иногда дополнительно применяется лагранжева модель для расчета переноса пыли (RAPTAD, PANACHE). Наиболее совершенные программы учитывают факторы химической кинетики (ADAM, ADMS-3, CAMx, PANACHE, REMSAD, RPM-IV и другие), переноса тепла (ADAM, PANACHE), сложной геометрии области (ADMS-3, ISC-3, PANACHE и другие), турбулентности (PANACHE).

Подобные расчеты также могут производиться универсальными системами моделирования (FlowVision, FLUENT, GAS DYNAMICS TOOL, PHOENICS, Star-CD и другими), многие из которых существуют как в однопроцессорной, так и в многопроцессорной версиях. Рассмотрим некоторые универсальные системы.

Пакет GAS DYNAMICS TOOL позволяет рассчитывать многофазные течения (с учетом тепла, химической кинетики, межфазных переходов) в областях сложной формы путем численного решения трехмерных уравнений Эйлера или Навье-Стокса (на однопроцессорных и многопроцессорных системах). Используется метод крупных частиц на основе явной двухшаговой схемы первого порядка. Данный пакет не учитывает факторы турбулентности и излучения.

Значительно более мощным является пакет Star-CD, позволяющий рассчитывать многофазные потоки (с учетом межфазных переходов, тепла, турбулентности и химической кинетики) путем численного решения трехмерных уравнений Навье-Стокса или Рейнольдса. Пакет предоставляет широкий выбор моделей турбулентности. Существует и параллельная реализация данного пакета Star-HPC, показывающая достаточно хорошие результаты по эффективности распараллеливания.

Пакет FLUENT является одним из наиболее популярных и мощных средств для однопроцессорных и параллельных расчетов многофазных потоков с учетом межфазных переходов, тепла, излучения, наличия дискретных сред (капель, пылевых частиц) и других факторов.

Имеются различные модели турбулентности и прочих физических процессов.

Универсальность упомянутых пакетов фактически заключается в попытках применения достаточно ограниченного набора моделей, алгоритмов и методов к множеству различных случаев. Очевидно, что программы, ориентированные на решение конкретного класса задач способны решать данные задачи более эффективно.

Значительно меньшее число специализированных программ моделирования распространения загрязнений ориентировано исключительно на многопроцессорные системы. Две наиболее известные разработки: ECOSIM и MAQSIP. Оба программных комплекса имеют модульную структуру, причем распараллелены лишь некоторые модули. Так, в ECOSIM распараллелен модуль, осуществляющий интегрирование уравнений переноса загрязнителей и уравнений химической кинетики. В MAQSIP распараллелен модуль, отвечающий за моделирование образования аэрозолей. Безусловно, для обеспечения наивысшей эффективности вычислений необходима более высокая степень распараллеливания, что возможно лишь при организации системы как единого целого. В свою очередь, повышение эффективности вычислений позволяет использовать более сложные и точные математические модели и методы решения.

### **Вычислительная гидродинамика CFD**

По данным источника [19] некоторые из вышеперечисленных программных продуктов относятся к отдельно рассматриваемому классу моделей - классу CFD. Computational fluid dynamics (CFD) или вычислительная гидродинамика - это совокупность физических, математических или численных методов, предназначенных для компьютерного моделирования процессов происходящих в жидкой или газообразной среде. CFD позволяет построение виртуальной модели процесса или устройства, разбиение которого на элементарные элементы делает возможным прямое решение базовых уравнений, формулирующихся физическими и химическими механизмами, характерными для данного процесса. Вычислительная гидродинамика позволяет работать в таких областях, как: гидро- и газодинамика, тепло- и массоперенос, движущиеся тела, многофазные потоки, химические реакции, горение, турбулентность, акустика, сопротивление материалов.

Базой любого исследования в области вычислительной гидродинамики является формулировка основных уравнений гидро/газодинамики потоков, а именно:

- уравнения неразрывности;
- уравнения сохранения импульса;
- уравнение сохранения энергии;
- уравнение состояния (для газов).

Вышеназванные уравнения представляют собой базовую модель течения среды, которая в зависимости от особенностей решаемой задачи может быть дополнена уравнениями для моделей турбулентности, переноса веществ, химических реакций, учета многофазности, электромагнитных взаимодействий и т. д.

Все перечисленные математические формулировки являются системой нелинейных дифференциальных уравнений 2-го порядка, имеющих аналитическое решение лишь в очень простых случаях. Для широкого спектра природных и технологических процессов задачу можно решить численно в том случае, если производные, стоящие в уравнениях, заменить на конечные разности, созданные на малых пространственных и временных интервалах. В случае моделирования реального процесса производится так называемая дискретизация пространства и времени, таким образом, что геометрия процесса разбивается на расчетные ячейки, выбранные особым образом, а время процесса — на расчетные временные интервалы. Существуют различные методы решения системы уравнений, применяемые в CFD-моделях [20]:

- метод конечных разностей;
- метод конечных объемов;
- метод конечных элементов;
- метод сглаженных частиц;
- метод с использованием функции распределения вероятности.

Реализуются данные методы с помощью программных модулей - CFD-решателей.

Такое физическое моделирование позволяет проводить оптимизацию технологических процессов, в короткие сроки, тестируя многочисленные варианты работы, позволяя предсказать различные сценарии развития процесса при варьировании исходных данных. [21]

### **Выводы**

В результате исследования установлено, что построение единой классификации моделей распространения примесей от точечных источников представляет трудноразрешимую задачу в виду многогранности и многоаспектности подходов к моделированию. В работе предпринята попытка упорядочить множественные подходы к решению данной задачи. Можно утверждать, что модели, используемые на практике, являются, во-первых, специализированными, а во-вторых — интегральными.



Специализация моделей проявляется в их тесной привязке к конкретным местностям, погодным условиям, масштабам и т.п. факторам. Интегральность проявляется в том, что современные модели представляют собой фактически супермодели, образующие систему подмоделей, предназначенных для решения узких задач: моделирование турбулентности, осаждения, диффузии и т.д.

Установлено, что возникающая на практике задача моделирования в больших масштабах при учете большого числа факторов и т.п. требует значительных вычислительных ресурсов, прежде всего это связано с необходимостью решать системы уравнений

большой размерности. Анализ существующих программных реализаций для моделей распространений примесей позволяет утверждать, что лишь незначительное их число предлагается в виде реализации для многопроцессорных систем. В связи с этим можно утверждать, что реализация данных моделей, особенно моделей на основе уравнений вычислительной гидродинамики, на параллельных компьютерных системах представляет собой актуальную научную задачу.

Поиск подходов к решению данной задачи является дальнейшим направлением исследования.

### Литература

1. Донецкий экологический портал [электронный ресурс], режим доступа: <http://www.doneco.org.ua>
2. Disperse Stack, P&I Design Ltd, Thornaby, UK, 2003
3. Hanna, S., R, Drivas, P., J, Chang, J., C, Guidelines for use of Vapor Cloud Dispersion Models, AIChE/ CCPS, New York, NY, SUA, p. 102, 1989;
4. Heerden, j., Sullivan, P, The application of CFD for evaluation of dust suppression and auxiliary ventilating systems, Proceedings of the Sixth U.S.Mine Ventilation Symposium, Littleton, CO, USA, p.479-484, 1993;
5. Pasquill, F, Atmospheric Diffusion, 2<sup>nd</sup> Edition, Ellis Harwood limited, UK, 1974;
6. European Topic Centre on Air & Climate Change, Brussels, 2003;
7. Enescu Maria, The elements of the dispersion theory applied to the mathematical shaping of the atmosphere pollution by high burning installation – i.m.a. Proc. International conference "The knowledge society in the space of united Europe" May 29<sup>th</sup> - 30<sup>th</sup>, 2009, Timișoara, ROMANIA.
8. Cole, C., F, Fabrick, A., J, Surface mine pit retention, Journal of Air Pollution Control Association, 34(6), p.674-675, 1984;
9. Collett, R.,S., Oduyemi, K., Air Quality Modeling: A Technical Review of Mathematical Approaches, Meteorological Application, 4(3), 1997, p.235-246;
10. Региональные публикации ВОЗ, Европейская серия, № 85
11. Zannetti, P. Numerical simulation modelling of air pollution: an overview. Air pollution. Southampton, Computational Mechanics Publications, 1993, pp. 3–14.
12. Moussiopoulos, N. Ambient air quality, pollutant dispersion and transport models Copenhagen, European Environment Agency, 1996 Topic Report No. 19.
13. Состояние воздушного бассейна городов [электронный ресурс], режим доступа: <http://www.ecocommunity.ru/refer.php?flag=1&page=35&id=40>
14. Экология окружающей среды [электронный ресурс], режим доступа: <http://www.ecomir.net/show/1270/>
15. Мониторинг состояния окружающей среды. Нормирование качества окружающей среды [электронный ресурс], режим доступа: <http://www.masters.donntu.edu.ua/2002/feht/lukina/library/index10.htm>
16. Прогноз качества воздуха. Обзор федеральных программ и потребностей исследования [электронный ресурс], режим доступа: <http://www.uran.donetsk.ua/~masters/2009/fvti/daikun/library/translate.htm>
17. Alternative Models [электронный ресурс], режим доступа: [http://www.epa.gov/scram001/dispersion\\_alt.htm](http://www.epa.gov/scram001/dispersion_alt.htm)
19. Computational fluid dynamics [электронный ресурс], режим доступа: <http://www.cfdgroup.ru/glossary/test>
20. Вычислительная гидродинамика [электронный ресурс], режим доступа: [http://ru.wikipedia.org/wiki/Вычислительная\\_гидродинамика](http://ru.wikipedia.org/wiki/Вычислительная_гидродинамика)
21. Computational fluid dynamics - Definition [электронный ресурс], режим доступа: [http://www.wordiq.com/definition/Computational\\_fluid\\_dynamics](http://www.wordiq.com/definition/Computational_fluid_dynamics)

Надійшла до редакції 20.02.2011