

ПРОБЛЕМАТИКА СУЩЕСТВУЮЩИХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ АВАРИЙНО ХИМИЧЕСКИ ОПАСНЫХ ВЕЩЕСТВ

THE PROBLEMS OF EXISTING MATHEMATICAL MODELS FOR PREDICTING THE SPREAD OF HAZARDOUS CHEMICALS

K. Fatkhullin
A. Kudelin

Summary. This study analyzes the existing deterministic mathematical models for predicting the release of chemicals. The purpose of this analysis was to determine the equations included in the models, the numerical methods used, the limitations of each model, as well as the implementation of the models considered. The study included a literature review and analysis of various deterministic models. Aspects such as the use of various parameters, including meteorological conditions, physical properties of the substance, geographical data, and data on the distribution of areas, were considered. The results of the analysis showed that each model has its advantages and limitations. Some models present more accurate results based on the laws of physics and chemistry but require a large amount of data and high computing power. On the other hand, more simplified (two-dimensional) models produce results much faster. Based on the analysis, it can be concluded that the choice of a model for predicting the release of chemicals should be based on the specific requirements and goals of a particular study or task. Further research may include the development of improved models, consideration of new factors and parameters, as well as more accurate calibration using real data.

Keywords: numerical methods, equations of mathematical physics, release of substances as a result of a man-made accident, forecasting.

Фатхуллин Константин Дамирович

аспирант, ФГБОУ «Ухтинский
государственный технический университет»
fatkhullin.k@yandex.ru

Куделин Артем Георгиевич

кандидат технических наук, доцент, ФГБОУ «Ухтинский
государственный технический университет»
akudelin@ugtu.net

Аннотация. В данном исследовании проведен анализ существующих детерминированных математических моделей для прогнозирования выброса химических веществ. Цель данного анализа была определить уравнения, входящие в модели, используемые численные методы, ограничения каждой модели, а также реализацию рассмотренных моделей. Исследование включало обзор литературы и анализ различных детерминированных моделей. Были рассмотрены такие аспекты, как использование различных параметров, включая метеорологические условия, физические свойства вещества, географические данные и данные о распределении площадей. Результаты анализа показали, что каждая модель имеет свои преимущества и ограничения. Некоторые модели, представляют более точные результаты, основанные на законах физики и химии, но требуют большого количества данных и высокой вычислительной мощности. С другой стороны, более упрощенные модели (двумерные) дают результат намного быстрее. На основе анализа можно сделать вывод, что выбор модели для прогнозирования выброса химических веществ должен основываться на специфических требованиях и целях конкретного исследования или задачи. Дальнейшие исследования могут включать разработку улучшенных моделей, учет новых факторов и параметров, а также более точную калибровку с использованием реальных данных.

Ключевые слова: численные методы, уравнения математической физики, выброс веществ в результате техногенной аварии, прогнозирование.

Введение

Современный мир характеризуется высоким уровнем техногенного развития, который, несомненно, улучшает качество жизни людей. Однако каждый техногенный процесс несет в себе потенциальные риски аварий, которые могут привести к выбросу опасных химических веществ и повышению экологической угрозы. В связи с этим, моделирование процессов выброса опасных веществ при техногенных авариях является важным инструментом для прогнозирования их развития, а также для разработки систем противодействия. В данной статье будет проведен анализ существующих математических моделей, используемых для прогнозирования выброса опасных химических веществ в результате техногенной аварии. Проблема моделирования

процесса выброса химических веществ в результате техногенной аварии является актуальной и важной в настоящее время. Во-первых, это связано с ростом количества промышленных объектов, где хранятся и используются опасные вещества, что повышает риск возникновения аварий. Во-вторых, участились случаи террористических актов с использованием химических веществ, что требует эффективных методов прогнозирования и борьбы с последствиями. Моделирование процесса выброса ядовитых веществ является необходимым для оценки опасности возможных аварий и разработки планов мероприятий по защите населения и окружающей среды. Кроме того, такое моделирование может использоваться для совершенствования систем предупреждения и управления кризисными ситуациями. Математические модели прогнозирования выброса химических веществ

находят широкое применение в области охраны окружающей среды и промышленной безопасности. Они используются для оценки и предсказания выбросов различных химических веществ в атмосферу, воду и почву. Прогнозирование выброса опасных веществ в результате техногенных аварий является крайне сложной задачей, которая требует использования специальных математических моделей. Все существующие модели имеют свои ограничения и недостатки, что затрудняет процесс прогнозирования выброса опасных веществ. Возникает необходимость в проведении анализа существующих математических моделей, в целях улучшения их работоспособности и перспективности при решении данной проблемы. Одним из основных недостатков существующих моделей является их низкая точность. Это объясняется тем, что прогнозирование выброса опасных веществ в реальных условиях включает множество переменных, которые могут иметь различные значения в зависимости от конкретной ситуации. Кроме того, существующие модели часто ориентированы на определенные типы аварий, что ограничивает их применение в реальных условиях. Другим важным недостатком существующих моделей является их сложность. Многие модели требуют комплексного математического аппарата и значительных вычислительных ресурсов, что делает их применение трудоемким и дорогостоящим процессом.

Материалы и методы

Для исследования и анализа моделей прогнозирования выброса аварийно-химически опасных веществ были использованы следующие методы и подходы:

1. Обзор литературы и анализ существующих моделей — это основной метод, который позволяет ознакомиться с различными подходами и методическими аспектами, используемыми в моделировании выбросов химических веществ. Обзор включает изучение как теоретических основ, так и практических применений различных моделей.
2. Определение уравнений, используемых в моделях — каждый тип моделей использует свою систему уравнений.
3. Определение численных методов для решения уравнений, использующихся в моделях.
4. Анализ ограничений моделей — каждая модель имеет свои ограничения и области применимости, такие как требования к точности входных данных, вычислительная мощность, сложность уравнений и спецификация начальных условий.
5. Реализация моделей и программное обеспечение — для реализации моделей часто используются специализированные программы, такие как Ansys FLUENT, или создаются собственные программные комплексы.

Результаты

На сегодняшний день существует множество моделей и программного обеспечения, которые позволяют прогнозировать распространение отравляющих веществ в результате техногенной аварии. Рассмотрим некоторые из них (таблица 1):

Таблица 1.

Анализ моделей прогнозирования выброса веществ

Название модели	1. Модель подъема облака нагретого газа [1]
Используемые уравнения	Система уравнений, представленная в модели, используется для моделирования и анализа течений газа в различных условиях: 1. Уравнение непрерывности: обеспечивает сохранение массы в течение времени и пространства в потоке жидкости или газа. 2. Уравнение движения (Навье-Стокса): описывает динамику потока, включая ускорение, давление и внутренние силы, как вязкие силы. 3. Уравнение энергии: сохраняет энергию в системе, распределяя кинетическую энергию, внутреннюю энергию и теплообмен в потоке. 4. Тензор вязких напряжений: описывает внутренние силы в жидкости или газе, соответствующие вязкости, и влияет на распределение напряжений и деформаций в потоке. 5. Уравнение кинетической энергии турбулентности и уравнение скорости диссипации энергии (k - ϵ модель): моделирует поведение турбулентных потоков, где k — кинетическая энергия турбулентности, ϵ — скорость диссипации энергии, что позволяет учитывать элементы турбулентности в потоке. 6. Уравнение турбулентной диффузии для отдельной частицы: описывает, как распределяется и перемещается частица в турбулентном потоке, учитывая эффект турбулентной диффузии. Вместе, эта система уравнений позволяет детально описывать и предсказывать поведение жидких и газовых потоков в широком диапазоне условий, от бытовых до промышленных и природных приложений.
Численные методы решения	Модель использует численные методы вычислений для нахождения значений параметров во времени и пространстве
Апробация	Эту модель использовали для расчета приземных концентраций опасных веществ, которые могут выделяться при взрыве железнодорожной цистерны с ядовитым веществом на объекте хранения. Приведены результаты расчета обтекания облаком взрыва препятствий различной высоты в виде элементов промышленной застройки, также показана эволюция облака газа при обтекании препятствий. Описаны расчеты концентраций опасных веществ, выделяющихся при взрыве железнодорожной цистерны с люзитом. В расчетах учитывались параметры облака взрыва, его начальные термодинамические характеристики, влияние ветра и скорость оседания токсичных примесей.

	<p>Исходное облако моделировалось как полусфера, и его диаметр оценивался на основе массы взрывчатого вещества. Приведены примеры результатов расчетов для газообразных продуктов и аэрозолей, а также эволюция облака при обтекании препятствий промышленной застройки. Однако результаты расчета не подтверждены результатами экспериментальных данных, а также не представлено сравнение с результатами расчета приземных концентраций опасных веществ другим методом, что позволило бы определить эффективность модели. Нет данных о программном обеспечении, которое использовалось для данных расчетов.</p>
Сложности при использовании	<p>Высокая вычислительная сложность: Процесс моделирования требует мощных компьютеров, особенно для создания детализированных моделей.</p> <p>Необходимость точных входных данных: для точных расчетов требуется подробная информация о свойствах газа, окружающей среды и условиях, в которых происходит процесс.</p> <p>Зависимость от уравнений: Модель полагается на сложные уравнения, которые могут плохо работать в некоторых условиях.</p> <p>Ошибки и приближения: всегда существуют некоторые ошибки и допущения, которые могут вносить неточности в результаты.</p>
Название модели	2. Модель распространения облаков легких и нейтральных ОХВ в условиях устойчивой атмосферы [2]
Используемые уравнения	<p>Система уравнений модели используется в вычислительной гидродинамике для моделирования сложных течений газа. Составляющие:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Уравнение неразрывности: обеспечивает сохранение массы в течение времени и пространства в потоке жидкости или газа. 2. Уравнение диффузии: описывает процесс распространения вещества в газе из областей высокой концентрации в области с низкой концентрацией. 3. Осредненное по Рейнольдсу уравнение движения: моделирует движение жидкости или газа, учитывая эффекты турбулентности. Распределяет влияние турбулентных флуктуаций по осредненным компонентам скорости потока. 4. Осредненное по Рейнольдсу уравнение энергии для температуры: Предназначено для описания переноса тепла с учетом турбулентных эффектов. Важно для расчета температурных полей в турбулентных потоках. 5. Уравнение кинетической энергии турбулентности (k-уравнение): моделирует динамику турбулентной энергии, то есть энергии, хранящейся во флуктуациях скорости. Это важно для понимания и предсказания турбулентных характеристик потока. 6. Уравнение скорости рассеивания (ϵ-уравнение): описывает скорость, с которой турбулентная энергия (k) диссипируется (или уходит) из системы. Это помогает моделировать процесс затухания турбулентных вихрей и других мелкомасштабных явлений.

	<p>Вместе эти уравнения позволяют детально смоделировать поведение турбулентных потоков, что критически важно для множества инженерных задач, включая аэродинамику, гидродинамику, процессы горения, теплообмен и многие другие прикладные области.</p>
Численные методы решения	<p>Метод контрольного объема. Он заключается в разбиении области расчетов на небольшие объемы (ячейки) и интегрировании уравнений по каждому из них. Это позволяет преобразовать дифференциальные уравнения в алгебраические, которые удобнее решать численными методами.</p>
Апробация	<p>Модель была реализована с использованием пакета Ansys FLUENT.</p> <p>Результаты модели проверили путем сравнения с экспериментальными данными. Расхождение составило 20 %, что считается приемлемым для такого рода сложных задач. В статье [2] указывалось, что их численная модель давала вполне адекватные прогнозы масштабов заражения при авариях.</p> <p>В частности, в исследовании рассматривалось влияние угла наклона подстилающей поверхности и атмосферной устойчивости на распространение облаков легких (аммиак, метан) и нейтральных (этан, этилен) газов. Обнаружены следующие закономерности:</p> <p>Легкие газы:</p> <p>Аммиак стелился по земле при движении в горизонте и в горку 15 и 30°, отрывался от склона при движении с горки. Метан сначала стелился по земле, потом поднимался под углом 40°, при движении в горку отрывался или нет, в зависимости от угла наклона, при движении с горки поднимался под углом 40-45°.</p> <p>Нейтральные газы:</p> <p>Этан и этилен при движении в горку в условиях инверсии сначала двигались против ветра, затем по ветру к склону из-за рециркуляционного потока.</p> <p>При движении этилена с горки облако либо разделялось, либо стекало вниз по склону с горизонтальной верхней границей.</p>
Сложности при использовании	<p>Сложность уравнений: Уравнения Навье-Стокса нелинейны и сложно решаемы аналитически, поэтому необходимо использовать численные методы, что требует значительных ресурсов.</p> <p>Моделирование турбулентности: Подбор модели турбулентности требует тщательной проверки и экспериментальных данных для валидации.</p> <p>Необходимость во входных данных: требуется точная информация о полях ветра, начальных и граничных условиях, а также свойствах среды.</p> <p>Вычислительные ресурсы: Моделирование требует мощных вычислительных ресурсов, особенно для крупных задач.</p> <p>Неопределенность результатов: Турбулентные потоки имеют высокую степень случайности, что вносит неопределенность в результаты.</p>

Название модели	3. Модель процесса парообразования при кипении аварийного пролива сжиженного газа [3]
Используемые уравнения	<p>Эта система уравнений используется для моделирования сложных физических процессов в турбулентном потоке жидкости (или газа), включающих взаимодействие скорости, давления, температуры и концентрации. Краткое назначение каждого уравнения:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Уравнение неразрывности: обеспечивает сохранение массы в течение времени и пространства в потоке жидкости или газа. 2. Уравнение диффузии: описывает процесс распространения вещества в газе из областей высокой концентрации в области с низкой концентрацией. 3. Уравнение движения (по Рейнольдсу): описывает баланс сил и движение газа, учитывая вязкость и инерционные силы. 4. Уравнение энергии для температуры: определяет распределение и транспорт тепловой энергии в системе. 5. Уравнение кинетической энергии турбулентности: оценивает уровень турбулентности и распределение энергии турбулентного движения. 6. Уравнение скорости рассеивания: описывает процесс диссипации турбулентной кинетической энергии. 7. Уравнение теплопроводности для твердого слоя: моделирует передачу тепла в твердом материале, контактирующем с жидкостью или газом. <p>Эта система уравнений позволяет проводить комплексные расчеты, необходимые для понимания и прогнозирования поведения турбулентных потоков с учетом взаимодействия тепловых и механических процессов, что важно в аэродинамике, теплообмене и химической инженерии.</p>
Численные методы решения	<p>Метод контрольного объема. Вся исследуемая область разбивается на множество малых объемов (ячейки). Физические уравнения интегрируются внутри каждого контрольного объема, превращая дифференциальные уравнения в алгебраические. Применяются законы сохранения для каждого объема, определяя потоки величин через границы контрольных объемов. Уравнения связывают величины в соседних ячейках, учитывая граничные условия. Полученная система алгебраических уравнений решается численными методами, вычисляя значения интересующих переменных.</p>
Апробация	<p>При сравнении с официальными методами (ГОСТ), численная модель показала различия. ГОСТ не учитывает некоторые нюансы испарения газа, что объясняет расхождение в результатах.</p> <p>В исследовании анализировались результаты испарения сжиженного бутана при разных скоростях ветра (1, 2, 3 м/с). Расчеты показывают, что при более высоких скоростях ветра удельная масса испарившегося бутана выше. Температура жидкости изменяется в зависимости от скорости ветра: при низких скоростях (1 м/с) она остается стабильной дольше, а при высоких скоростях (2 и 3 м/с) снижается быстрее.</p>

	<p>Тепловые потоки от подстилающей поверхности значимее, чем от атмосферы.</p> <p>При высоких скоростях ветра происходит переход от режима кипения к режиму диффузионного испарения, что не учитывается в существующих методиках.</p> <p>Влияние теплопритока из атмосферы больше при увеличении скорости ветра, но в целом остается небольшим по сравнению с теплопритоком от подстилающей поверхности.</p> <p>Для решения системы уравнений используется программа Ansys FLUENT.</p>
Сложности при использовании	<p>Фазовые переходы: Газ при изменениях из жидкости в пар существенно меняет свои свойства такие как плотность и вязкость.</p> <p>Теплопередача: необходимо учитывать, как тепло передается от окружающей среды к газу и обратно.</p> <p>Смешивание и диффузия: Газ взаимодействует с воздухом, что влияет на его концентрацию.</p> <p>Большие масштабы и сложная геометрия: Место аварии может быть большим и сложным (с преградами и сооружениями), что делает расчеты сложными.</p> <p>Недостаток экспериментальных данных: часто не хватает реальных экспериментальных данных для проверки модели.</p>
Название модели	4. Модель распространения радиоактивных веществ в атмосфере [4]
Используемые уравнения	<p>Нестационарное трехмерное уравнение турбулентной диффузии для средних значений объемных активностей в прямоугольных декартовых координатах.</p> <p>Основной принцип уравнения заключается в следующем:</p> <p>Конвекция: Перенос вещества потоком среды. Скорости течения среды учитываются в трех направлениях (x, y, z).</p> <p>Диффузия: Вещество также распространяется из областей с высокой концентрацией в области с низкой концентрацией за счет молекулярной и турбулентной диффузии.</p> <p>Источники и стоки: Наличие внутренних источников и стоков вещества, которые могут изменять концентрации во времени и пространстве.</p>
Численные методы решения	<p>Метод расщепления по пространственным переменным (нелинейная монотонная явная схема Ван Лира). Метод разделяет переменные, что позволяет рассмотреть каждую из пространственных переменных отдельно.</p> <p>В контексте нелинейных уравнений, таких как уравнения, описывающие динамику жидкости или газов, этот метод часто сочетает с явными и неявными схемами для достижения стабильности и точности</p>
Апробация	<p>Результаты проведенных вычислительных экспериментов удовлетворительно согласуются с результатами, полученными ранее другими авторами.</p> <p>На основе этой модели был создан программный комплекс RAD (RADiation), который помогает автоматизировать процесс моделирования и дает возможность быстро получать прогнозы о распространении радиоактивных</p>

	веществ) предназначенный для моделирования распространения радиоактивных загрязнений в атмосфере. Комплекс включает модули ввода данных, расчетный модуль, базу данных и визуализацию результатов. Используется для проведения экспериментов с различными параметрами, как например, скорости ветра и загрязняющие вещества, для оценки их влияния. Примеры экспериментов включают моделирование выбросов из точечного источника и аварийных выбросов на радиохимическом заводе. Результаты могут служить основой для планирования мероприятий по защите окружающей среды и эвакуации в случае аварий на АЭС.
Сложности при использовании	Физика процесса: Распространение радиоактивных веществ в воздухе зависит от множества факторов, таких как ветер, осаждение и распад частиц. Эти процессы сложно учесть все сразу, так как они меняются во времени и пространстве. Геометрия и масштаб: Моделирование требует учёта трёхмерного пространства, что требует большого количества вычислений и времени. Также важно правильно учитывать особенности местности (горы, реки и т. д.), которые могут влиять на распространение примесей. Данные и параметры: для точной работы модели необходимы точные данные о выбросах и климатических условиях. Сбор и обработка таких данных могут быть затруднительными. Радиационная плотность: для понимания воздействий радиоактивных веществ необходимо учитывать их радиационные характеристики, такие как тип излучения и его интенсивность. Это требует дополнительных знаний и данных, которые сложно получить.
Название модели	5. Модель распространения и осаждения ртути [5]
Используемые уравнения	Нестационарное трехмерное уравнение турбулентной диффузии в прямоугольных декартовых координатах используется для моделирования процесса распространения вещества (например, загрязняющих веществ, тепла или других скалярных величин) в турбулентной среде. Это уравнение учитывает как перенос вещества с течением (адвекция), так и его распространение за счет турбулентной диффузии. Оно особенно важно для предсказания динамики и распределения средних значений концентраций или активностей вещества во времени и пространстве в условиях, где присутствует турбулентность, такая как в атмосфере, водоемах или промышленных установках.
Численные методы решения	Метод фиктивных областей [9]. Основные этапы метода включают: Разделение области: разбивается исходная область на реальные и фиктивные подобласти. Задание условий: В фиктивных областях задаются упрощенные граничные условия, которые удобно решать с применением численных методов. Решение задачи: для всей области, включая реальные и фиктивные части, составляются и решаются соответствующие уравнения.

	Уточнение результатов: Вычисленные результаты уточняются в реальных областях, корректируя влияние фиктивных областей.
Апробация	Сравнение рассчитанных по модели и измеренных характеристик распространения ртути показало их удовлетворительное количественное соответствие. В данной работе [5] исследуется распространение и осаждение ртути в регионе Южного Байкала с использованием математической модели. Моделирование проводилось на площади 200x200 км ² и высотой 4 км, с временными шагами 150 секунд и горизонтальными шагами 1 км. Основные источники выбросов ртути находятся в городах Усолье-Сибирское, Ангарск, Шелехов, Иркутск, Слюдянка и Байкальск. Результаты моделирования показывают, что наиболее значительным вкладом в загрязнение озера вносят предприятия Слюдянки и Байкальска (72 % общего загрязнения), в то время как влияние Иркутско-Черемховского комплекса составляет лишь 28 % из-за удаленности источников выбросов. При северо-западном ветре со скоростью 2 м/с Приморский хребет и Олхинское плато задерживают значительную часть ртути. Также отмечено, что в радиусе 5 км от источников оседает около 10 % валового выброса ртути, что соответствует результатам других исследований. Информация о разработке программного обеспечения (ПО) отсутствует.
Сложности при использовании	1. География и геометрия: Регион Южного Байкала характеризуется сложной географией, включающей горные хребты, озера, реки и долины. Это может оказывать влияние на распределение ртути в атмосфере и ее осаждение. Моделирование таких систем требует использования трехмерных моделей с учетом географических особенностей. Кроме того, необходимо учитывать влияние сезонных изменений и метеорологических факторов на распространение ртути. 2. Данные и параметры: для разработки и калибровки модели необходимы точные и достоверные данные о выбросах ртути, метеорологических условиях, географии региона и других параметрах. Однако такие данные могут быть ограничены или недоступны. 3. Специализированность: модель разработана специально под конкретные условия региона, соответственно её сложно будет адаптировать под другие задачи.
Название модели	6. Модель движения легкой газовой примеси в потоке воздуха [6]
Используемые уравнения	Система уравнений необходима для моделирования и анализа поведения струи метана, выбрасываемой из источника, с учетом различных физико-химических процессов, происходящих в турбулентной среде: 1. Уравнение движения: описывает динамику струи метана с учетом импульса, передаваемого струе, а также учитывает эффект Буссинеска (применимо для плотностных струй, где различие в плотности играет важную роль).

	<p>2. Уравнение неразрывности: обеспечивает сохранение массы, с учетом добавления или удаления метана из системы (интенсивность поступления метана).</p> <p>3. Уравнение энергии турбулентности: описывает изменения кинетической энергии турбулентных вихрей в струе метана.</p> <p>4. Уравнение скорости диссипации турбулентной энергии: моделирует процесс диссипации (рассеивания) энергии турбулентности в результате вязких сил.</p> <p>5. Уравнение турбулентной вязкости: связывает турбулентную вязкость с кинетической энергией турбулентности и ее скоростью диссипации, что важно для определения напряжений и скорости смешивания в струе.</p> <p>6. Уравнение турбулентной диффузии: описывает процесс смешивания и диффузии метана в турбулентной среде, с учетом источников поступления метана.</p> <p>Система позволяет более точно предсказать распределение скорости, концентрации метана, и других характеристик струи в различных условиях.</p>
Численные методы решения	<p>Метод геометрического расщепления.</p> <p>Основные принципы метода геометрического расщепления:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Разбиение оператора (сложные уравнения разбиваются на несколько операторов). 2. Применение подоператоров (Каждый из операторов применяется к решению по очереди с небольшими временными шагами). 3. Симметричное расщепление (каждый оператор применяется по очереди с половинными шагами).
Апробация	<p>Исследование показало, что при аварийном сбросе метана наиболее опасна вертикальная струя газа, так как она быстро формирует детонационно-опасную концентрацию метана на значительных высотах. Распределение метана зависит от начального импульса, направления струи, расхода метана, скорости ветра и других факторов. Взрывоопасная смесь с воздухом формируется на высоте более 500 м при расходе метана 5 кг/(м·с), и детонация возможна на высоте до 3,5 км из-за молнии, самолета и других источников высокой температуры. Устойчивые вихревые образования метана объясняют причины техногенных катастроф и пожаров, требуя разработки новых стандартов по ограничению выбросов метана вблизи опасных объектов.</p> <p>Математическая модель полезна для уточнения методик вентилирования шахт, однако модель не подтверждается с помощью нормативных документов, нет информации сравнения результатов расчета. Информация о разработке программного обеспечения (ПО) отсутствует</p>
Сложности при использовании	<p>1. Ограничения на геометрию и пространственное разрешение: Двумерная модель ограничена использованием плоских координат и предполагает, что атмосфера однородна вдоль горизонтальной оси. Это может не учитывать пространственные вариации и неоднородности в атмосфере, которые влияют на перенос и рассеивание газа.</p>

	<p>Кроме того, пространственное разрешение модели может быть ограничено, что может привести к упущению мелких деталей и структур.</p> <p>2. Учет метеорологических условий и изменчивости: для точного моделирования переноса и рассеивания газа необходимо учитывать метеорологические условия, такие как скорость и направление ветра, температура, влажность и атмосферное давление. Однако в реальности метеорологические условия могут меняться со временем и пространством. Двумерная модель может ограничить возможность учета такой изменчивости, что может привести к неточностям и ограничению применимости.</p> <p>3. Ограничения на физические процессы: Двумерная модель может не учитывать все физические процессы, которые влияют на перенос и рассеивание газа.</p> <p>4. Валидация и проверка результатов: для использования двумерной модели необходима ее валидация и проверка с помощью надежных данных из натурных исследований или более сложных трехмерных моделей.</p>
Название модели	<p>7. Модель диффузии-конвекции с реакцией загрязняющих веществ, выделяемых автотранспортом в воздушную среду города [7]</p>
Используемые уравнения	<p>Нестационарное трехмерное уравнение с параметризуемыми коэффициентами турбулентного обмена и постоянной деструкции</p>
Численные методы решения	<p>Метод контрольного объема.</p> <p>Принцип действия:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Выделение контрольного объема. 2. Определение границ (Рассматриваются все входящие и исходящие потоки через границы контрольного объема. Для этого применяется баланс масс, импульса и энергии). 3. Анализ потоков. 4. Применение законов сохранения. 5. Интегральные и дифференциальные уравнения (Для систематизации и упрощения анализа используются соответствующие математические уравнения, которые помогают описать поведение системы внутри контрольного объема).
Апробация	<p>Эффект влияния подвижных источников на окружающую среду в моделях транспорта вредной примеси можно моделировать наземным линейным источником, очертающим которого совпадают с их траекторией движения, однако данные, полученные в результате численного эксперимента, не подвергались сравнению</p> <p>Разработанная модель реализована в программном комплексе MPI. Представленный программный комплекс для моделирования в городе Таганрог включает геоинформационную базу, параллельные программы моделирования ветровых течений и выбросов автотранспорта, а также модуль визуализации. Он исследует зависимость концентрации загрязняющих веществ от различных факторов, учитывая рельеф местности и застройку, и отображает результаты на рельефной карте. Комплекс может использоваться для установления норм выбросов.</p>

Сложности при использовании	<p>1. Определение параметров модели: для корректного использования модели необходимо определить значения параметров, таких как коэффициенты турбулентного обмена и постоянная деструкции.</p> <p>2. Валидация и проверка результатов: как и в случае с другими моделями, важно проводить валидацию и проверку результатов моделирования с помощью наблюдений из натуральных исследований или данных из мониторинговых станций.</p> <p>3. Ограничение точности данных о выбросах: для точного моделирования необходимы достоверные данные о выбросах загрязняющих веществ, выделяемых автотранспортом в воздушную среду города.</p> <p>4. Специализированность: модель разработана специально под конкретные условия региона, соответственно её сложно будет адаптировать под другие задачи.</p>
Название модели	8. Модель для расчета динамики загрязнения атмосферы над городом при ЧС в хранилище твердого ракетного топлива [8]
Используемые уравнения	<p>Система уравнений:</p> <ol style="list-style-type: none"> Осреднённое по высоте уравнение переноса Г.И. Марчука; Нульмерная модель. <p>Эта система уравнений используется для моделирования и прогнозирования климатических и метеорологических процессов. Осреднённое по высоте уравнение переноса Г.И. Марчука позволяет учитывать среднее поведение атмосферы и упрощает вычисления за счет усреднения параметров по высоте, что делает модель менее требовательной к вычислительным ресурсам. Нульмерная модель, в свою очередь, рассматривает систему в усредненных параметрах без детализации в пространстве и времени, что позволяет оценивать общие тенденции и влияет на более грубые оценки климатических изменений и процессов. Вместе эти уравнения помогают понимать и предсказывать изменчивость атмосферы и климатическую динамику.</p>
Численные методы решения	<p>Попеременно-треугольная разностная схема расщепления.</p> <p>Принцип действия:</p> <ol style="list-style-type: none"> Разделение задачи по степеням свободы. Чередование решения подзадач. Треугольные замены. Корректировка и итерационность.
Апробация	<p>Построенная численная модель была использована для экспресс-прогноза уровня загрязнения атмосферного воздуха над г. Павлоград при чрезвычайной ситуации в хранилище твердого ракетного топлива, расположенного на территории Павлоградского химического завода.</p> <p>В работе представлена численная модель для расчета загрязнения атмосферы при горении твердого ракетного топлива, демонстрирующая динамику формирования зоны загрязнения в атмосфере на различных стадиях времени после начала аварии.</p>

	<p>В частности, были построены графики для времени $t=3, 7, 15, 19$ и 21 минут после начала горения топлива. Модель показывает, что зона наибольшего загрязнения находится вблизи хранилища и мигрирует через город по мере прекращения горения. Оценка концентрации опасного вещества в разных частях города Павлоград выявила значительный риск токсичного поражения. Подпрограмма «ZONA» рассчитывает зоны, где концентрация вредного вещества превышает пороговое значение, что позволяет быстро определить размеры опасной зоны и количество пострадавших людей. Сценарии при изменении скорости ветра также учитываются для оценки динамики зоны поражения.</p> <p>Основное преимущество модели — оперативность и точность получения данных, что критично для прогнозирования и реагирования в случае чрезвычайных ситуаций.</p>
Сложности при использовании	<ol style="list-style-type: none"> Большие масштабы моделирования: Учет больших масштабов моделирования может представлять сложности в терминах вычислительных ресурсов и времени. Двумерные модели не могут учесть пространственную вариативность и детали, которые могут быть важными для точного моделирования распространения загрязнения. Недостаточная информация о топливе и его свойствах: В случае ЧС в хранилище твердого ракетного топлива может быть ограниченная информация о самом топливе и его химических свойствах. Точные данные о составе, токсичности и физических характеристиках топлива могут быть ограничены или недоступны, что может затруднить точное моделирование динамики загрязнения. Сложность интерпретации результатов модели: Результаты двумерной модели могут быть сложны для интерпретации и понимания для неспециалистов. Это может создавать проблемы при передаче информации и принятии решений местными органами власти и обществом.
Название модели	9. Модель рассеивания загрязнений, вызванных столкновением автоцистерны с хлором и выбросом хлора в атмосферу [11]
Используемые уравнения	<p>Система уравнений:</p> <ol style="list-style-type: none"> Диагностическая модель поля скорости воздуха — позволяет понять, как воздух движется в пространстве, что важно для определения траекторий частиц. Модель Лагранжевых частиц модифицированная (дополнена алгоритмами для учета поведения частиц загрязнений, включая изменение скорости частиц при столкновениях с поверхностью и верхними границами слоя смешанных условий) — помогает отслеживать движение отдельных частиц загрязнений, учитывая их взаимодействие с окружающей средой, такими как столкновения с поверхностями и верхними границами слоев.
Численные методы решения	Метод конечных разностей; для моделирования концентрации загрязнений применялись методы подсчета частиц в отдельных объемах атмосферы

	<p>Принцип действия:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Дискретизация пространства. 2. Аппроксимация производных. 3. Постановка разностных уравнений. 4. Решение системы уравнений.
Апробация	<p>Модель была валидирована и верифицирована. Программное обеспечение написано на Pascal Delphi. Модель позволяет определять векторное поле скорости воздуха и моделировать дисперсию загрязнителей в топографически сложных областях, включая застроенные городские районы. Используемая модель позволяет учитывать стохастический характер явлений турбулентности. Вычисления с использованием модели обычно занимают от нескольких до нескольких десятков минут.</p> <p>Анализ, с помощью модели, внезапного выброса хлора в результате столкновения грузовика-цистерны в городе Бельско-Бяла показывает, что такое происшествие может привести к локальной химической аварии. В зависимости от направления ветра число пострадавших может составлять от 19 до 22 тысяч человек, из которых до 5 тысяч могут погибнуть. Уровень воздействия на жителей зависит от атмосферных условий, параметров утечки, температуры, направления ветра и особенностей местности. Город окружен холмами, что может способствовать задержке и накоплению токсичных веществ. Моделирование распространения загрязнений с использованием оригинального программного обеспечения позволяет точно анализировать последствия аварий с учетом метеорологических и топографии местности.</p>
Сложности при использовании	<ol style="list-style-type: none"> 1. Необходимость корректировки начального поля скорости воздуха для удовлетворения уравнения непрерывности, что требует дополнительных вычислений и адаптации модели к комплексным условиям в городских районах. 2. Для учета турбулентности используется метод Монте-Карло, требующий значительных вычислительных ресурсов, сложен в реализации. 3. В связи с особенностями математических моделей использование полученных результатов требует глубокого понимания физических процессов и методологии расчетов. 4. Модель может быть менее эффективной в различных сценариях, например, при необходимости учета микроскопических деталей зданий или при расчетах на больших пространствах.
Название модели	10. Двумерная модель распространения энергии и массы, основанная на концепции клеточных автоматов [12]
Используемые уравнения	Уравнение диффузии модифицированное (скорость передачи энергии зависит от градиента энергии между соседними клетками, коэффициента атмосферной трансмиссивности и коэффициента поглощения среды; вводятся параметры направленности распространения энергии для учета влияния ветра и других факторов.)

Численные методы решения	Метод конечных разностей (разбиение пространства на матрицу однородных квадратных ячеек (клеток); моделирование распространения энергии как диффузионный процесс)
Апробация	<p>Разработана модель на основе клеточных автоматов, которая позволяет моделировать самоэволюционирующие процессы при авариях в промышленности, связанные с неконтролируемым высвобождением энергии и вещества. Модель учитывает влияние локальных факторов (атмосферная трансмиссивность, поглощение объектами, направленность распространения) на динамику распространения энергии и токсичных веществ, в отличие от традиционных подходов.</p> <p>Результат моделирования — гетерогенная мозаика уязвимости ячеек, а не однородные круговые контуры риска, как в традиционных методах. Это дает более реалистичную оценку распространения аварийных факторов.</p>
Сложности при использовании	<ol style="list-style-type: none"> 1. Сложность калибровки модели и подбора значений параметров. Эти параметры зависят от конкретного аварийного сценария и требуют верификации по экспериментальным данным и данным о прошлых авариях. 2. Предположение о диффузионном характере распространения энергии и вещества может быть справедливым не для всех типов аварийных процессов, например, для быстрых взрывных процессов. 3. Модель не учитывает синергетические эффекты, когда несколько последовательных аварий могут усиливать друг друга.

Заключение

По результатам проведенного анализа предлагаю следующие суждения:

1. Точность рассмотренных моделей крайне мала, большинство авторов ссылаются на удовлетворительную точность, но при внимательном рассмотрении результатов работ, ссылаются на расхождение результатов численного моделирования и экспериментальных данных порядком 15–20 %.
2. В качестве подтверждения результатов численного моделирования идет ссылка на результаты схожего численного моделирования, однако нет подтверждения проверки результатов с экспериментальными данными, считаю, что недостаточно такого вида проверки для достоверности математической модели.
3. Представленные модели строятся на аналогичных расчетных моделях, однако численные методы для решения поставленных задач и начальные и граничные условия различны, поэтому для описания модели считаю необходимо более подробно отнестись к дискретизации используемой расчетной модели.
4. Недостаточно результатов апробации, действительно некоторые модели используются для ре-

ализации программного обеспечения, однако большинство нигде не используются вовсе, только лишь выносятся рекомендации по их использованию.

5. Модели на основе клеточных автоматов представляют собой перспективное направление в моделировании распространения химических загрязнений. Они позволяют учесть многие локальные

эффекты и нелинейные процессы, что улучшает точность прогнозирования. Однако их применение требует высоких вычислительных мощностей и тщательной настройки параметров модели. Для повышения достоверности таких моделей следует уделять больше внимания экспериментальной верификации и детальной дискретизации пространственного представления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аксаков А.В. Моделирование распространения выбросов опасных веществ с облаками горячего газа в условиях промышленной и городской застройки // Доклады ТУСУРа. Автоматизированные системы обработки информации, управления и проектирования. 2004. — С. 46–52.
2. Тюменев Т.Р., Поникаров С.И., Гасилов В.С. Прогнозирование распространения облаков легких и нейтральных ОХВ в условиях устойчивой атмосферы при помощи численного моделирования // Вестник Казанского технологического университета. 2006. С. 78–86.
3. Старовойтова Е.В., Галеев А.Д., Поникаров С.И. Численный анализ процесса парообразования при кипении аварийного пролива сжиженного газа // Пожаровзрывобезопасность. 2011. №20–2. С. 24–28.
4. Муратова Г.В., Глушанин М.В. Исследование процессов переноса, диффузии и трансформации радиоактивных примесей, поступающих в атмосферу при авариях на объектах энергетики // Вычислительные технологии. 2009. №14–2. С. 85–97.
5. Макухин В.Л., Потемкин В.Л. Моделирование переноса и трансформации загрязняющих примесей, в том числе ртути на акватории оз. Байкал // Междисциплинарный научный и прикладной журнал «Биосфера». 2012. №4–3. С. 286–292.
6. Цаплин А.И., Бояршинов М.Г. Моделирование переноса метана в атмосфере и оценка возможности его детонации при аварийном сбросе давления в газопроводе // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2010. №2. С. 45–53.
7. Сухинов А.И., Гадельшин В.К. 3D модель переноса загрязняющих веществ от автотранспорта в воздушную среду города // Известия Московского государственного технического университета МАМИ. 2008. №1(5). С. 114–118.
8. Беляев Н.Н., Берлов А.В., Шевченко А.В. Моделирование аварийного загрязнения атмосферы при чрезвычайной ситуации в хранилище твердого ракетного топлива // Наука и прогресс транспорта. Вестник Днепропетровского национального университета железнодорожного транспорта. 2014. №5(53).
9. Сироченко В.П. Применение метода фиктивных областей к двумерным задачам динамики вязкой жидкости // Самара: Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева. 2017. С. 1502–1506.
10. Русакова Т.И. Прогнозирование загрязнения воздушной среды от автотранспорта на улицах и в микрорайонах города // Наука и прогресс транспорта. Вестник Днепропетровского национального университета железнодорожного транспорта. 2013. №6(48).
11. Brzozowska L. Computer simulation of impacts of a chlorine tanker truck accident // Transportation Research Part D: Transport and Environment. 2016. №43. С. 107–122.
12. Sarkar C., Abbasi S.A. Enhancing the Accuracy of Forecasting Impact of Accidents in Chemical Process Industry by the Application of Cellular Automata Technique // Process Safety and Environmental Protection. 2006. № 84(5). С. 355–370.

© Фатхуллин Константин Дамирович (fathullin.k@yandex.ru); Куделин Артем Георгиевич (akudelin@ugtu.net)

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»