



Применение метода Монте-Карло в решении задач экологической химии

С. О. Травин¹✉, А. В. Рощин¹, Г. Г. Дука²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия, e-mail: TravinSO@yandex.ru

²Институт Химии Молдавской академии наук, г. Кишинев, Республика Молдова

Поступила в редакцию: 13.11.2020 г., после доработки: 07.12.2020 г., принята в печать: 08.12.2020

Аннотация – В статье рассматриваются возможности имитационного моделирования с применением метода Монте-Карло для задач прогнозирования последствий залповых выбросов загрязняющих веществ, их распространения и деградации в окружающей среде. Проведен обзор исторического развития данного класса методов моделирования. Рассмотрены предельные случаи режимов диффузии, дрейфа и химической деградации загрязняющего вещества, а также всевозможные их комбинации. Результаты модельных расчетов по Монте-Карло сопоставлены с полученными для идентичных условий результатами численного интегрирования дифференциального уравнения распространения загрязнителя. Показана полная адекватность имитационной модели и продемонстрированы ее преимущества, связанные с устойчивостью решения и меньшими затратами машинного времени. Показаны основные приемы для имплементации модели в среде VBA-Excel. Демонстрированы возможности разработанного программного инструментария для применения метода Монте-Карло к решению задач пространственно-временной динамики пятна загрязнения в естественных условиях. Проанализированы и сформулированы эффективные приемы получения кинетических кривых по концентрации загрязнителя для выбранного квадрата на местности и построения профилей загрязнения для указанного момента времени. Проведена оценка необходимых параметров модели для получения качественных кинетических кривых и выданы рекомендации по их оптимизации.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, массоперенос, залповые выбросы, моделирование окружающей среды, пространственно-временная динамика, вычислительная эффективность.

Simulation of chemical and ecological processes

Application of Monte Carlo method in environmental chemistry

Sergey O. Travin¹✉, Alexander V. Roshchin¹, and Gheorghe G. Duca²

¹N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, e-mail: TravinSO@yandex.ru

²Institute of Chemistry, Academy of Sciences of Moldova, Chisinau, Republic of Moldova

Received: November 13, 2020, Revised: December 7, 2020, Accepted: December 8, 2020

Abstract – The article discusses the possibilities of simulations using the Monte Carlo method for predicting the effects of salvo emissions of pollutants, their spread and degradation in the environment. The historical evolution of this class of modeling methods has been reviewed. Limit cases of diffusion, drift and chemical degradation of the pollutant, as well as all their combinations, are considered. The results of the Monte Carlo model calculations are compared with the results of numerical integration of the differential equation for pollutant spreading under identical conditions. The full adequacy of the simulation model is shown and its advantages associated with the stability of the solution and less machine time are demonstrated. The basic knacks for implementing the model in the VBA-Excel environment are described. The possibilities of the developed software tools for applying the Monte Carlo method to solve problems of spatiotemporal dynamics of pollution spot in natural conditions have been demonstrated. Effective methods for obtaining kinetic curves of pollutant concentration for selected square on terrain and constructing contamination profiles for specified time point have been analyzed and formulated. The required parameters of the model have been evaluated to obtain qualitative kinetic curves and recommendations for their optimization are given.

Keywords: Monte Carlo method, mass transfer, instantaneous release, environmental modeling, spatiotemporal dynamics, computational efficiency.

ВВЕДЕНИЕ

Задачи прогнозирования последствий залповых выбросов загрязняющих веществ (ЗВ), их распространения и деградации в окружающей среде имеют первостепенную важность для экологической химии. В предыдущей работе [1] мы показали, что решение уравнения диффузии (1) с одновременным потоковым массопереносом и химической трансформацией вызывает достаточно серьезные вычислительные сложности и практически исключает применение явных схем, что еще больше увеличивает вычислительную емкость процедуры.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \cdot \Delta c - \nabla(\vec{v}c) + w(\vec{x}, t) \quad (1)$$

Вычислительная емкость неявной схемы $O(n^3)$, где n – размерность сетки интегрирования по пространственным координатам (для сравнения – вычислительная емкость явной схемы $O(n^1)$), что для большинства реальных задач означает проигрыш примерно в тысячу раз при переходе от явной схемы к неявной).

Хорошо зарекомендовал себя алгоритм Крэнка-Николсона, в котором устойчивость схемы счета достигается практически без увеличения вычислительной емкости. Изящество схемы в том, что матрица для вычисления правых частей получается трехдиагональной. В этом случае для решения системы линейных уравнений нет необходимости ее инвертировать, задача решается методом «прогонки», который имеет вычислительную емкость $O(n^1)$.

Однако этот метод практически исключает возможность численного решения системы дифференциальных уравнений в тех случаях, когда необходимо проследить судьбу вещества, которое может распространяться по

нескольким фазово различным средам, например, по поверхности и внутри почвы, по воздуху и растворяться и переноситься с потоками поверхностных вод. А ведь именно такие задачи представляют наибольший интерес с точки зрения экологической химии и охраны окружающей среды.

Считается [2], и, по-видимому, это правильно, что все параметры, вводимые пользователем в модель, не могут быть точно определенными константами и обладают как неопределенностью, так и изменчивостью. Физические свойства соединений, такие как температура плавления или логарифм константы диссоциации, обычно имеют сравнительно небольшую ошибку в их оцененном или измеренном значении. Для ввода в модель достаточно одноточечной оценки значения таких переменных.

Иной случай, когда временные, пространственные или разнообразные локальные факторы могут привести к широкой вариабельности и целому диапазону значений для других входных параметров, используемых в модели. Это не вызвано погрешностью измерения, а лишь отражает изменчивость этих свойств при различных условиях окружающей среды.

Например, скорость разложения химического вещества может быть на порядок различной в зависимости от присутствия биологических клеточных инокулятов или метеорологических условий. Период полураспада пестицидов в почве может составлять от нескольких дней до нескольких месяцев или даже десятков лет в зависимости от свойств почвы и характеристик микробного сообщества [3].

Лишь недавно был предложен двухуровневый подход к оценке экологической стойкости химических веществ, которые использовали вероятностные мультимедийные модели судьбы [3, 4]. Подход второго уровня предполагал использование функций распределения в качестве входных данных для периодов полураспада для учета изменчивости и сообщения об общей стойкости в качестве распределения значений, а не оценки из одной точки. Оказалось, что такие модели удобно считать с использованием метода Монте-Карло.

Широкому распространению методов Монте-Карло способствовало бурное развитие компьютерных технологий. Алгоритмы Монте-Карло (как правило, обладающие небольшой связностью) сравнительно легко программируются и позволяют рассчитывать многие задачи, недоступные для классических численных методов. Так как совершенствование ЭВМ продолжается и вычислительные мощности прогрессируют по закону Мура, были все основания ожидать повсеместного применения методов Монте-Карло и дальнейшего расширения области использования таких моделей.

Но чуда не случилось. Попытки расширения области приложения моделей Монте-Карло пришли к насыщению, и их поток постепенно сошел на нет. По-видимому, одной из серьезных причин стала избыточная приверженность разработчиков моделей к чисто математической, теоретико-вероятностной трактовке моделей и достаточно бесплодным попыткам примирить предсказания Монте-Карло с интервальным подходом.

Применительно к прогнозированию поведения загрязняющих веществ в натуральных условиях для определения вероятности превышения критических значений концентраций часто используется исследование стохастических моделей по методу Монте-Карло.

Математически это требует оценки ожидания некоторой функции решения стохастической модели. Это можно переформулировать как колмогоровскую проблему финальной вероятности состояний.

Уравнения Колмогорова для переходной функции марковского случайного процесса дают возможность найти вероятности состояний системы в любой момент времени, если задать начальные условия и правила перехода от одного состояния к другому.

Исчерпывающей количественной характеристикой марковского процесса является совокупность вероятностей состояний, т.е. вероятностей $pi(t)$ того, что в момент t процесс будет находиться в состоянии s_i ($i = 1 \dots n$).

Если процесс, протекающий в системе, длится достаточно долго, то имеет смысл говорить о предельном поведении вероятностей $P_i(t)$ при $t \rightarrow \infty$. В некоторых случаях существуют финальные (предельные) вероятности состояний:

$$P_i = \lim_{t \rightarrow \infty} P_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

не зависящие от того, в каком состоянии система находилась в начальный момент. Говорят, что в системе устанавливается предельный стационарный режим, при котором она переходит из состояния в состояние, но вероятности состояний P_i уже не меняются во времени. Система, для которой существуют финальные состояния, называется эргодической, а соответствующий случайный процесс – эргодическим.

Не вызывает сомнений то, что «отрицательным аттрактором», фактически отталкивающим многих исследователей от применения монте-карловского подхода к природным экологическим явлениям, послужила ставшая знаменитой формулировка Ильи Пригожина [5]: «Динамические системы не интегрируемы и не эргодичны».

Известный специалист в этой области И.М. Соболев [6–8] отмечает, что среди методов Монте-Карло можно выделить методы, в которых полностью воспроизводится модель рассчитываемого процесса. Такие методы иногда называют «физическими», хотя представляется более удачным другое название этих методов – имитационные. Зачастую, при имитации вычисляется вся избыточная информация о течении процесса; однако в реальных задачах она не нужна. Искусство построения эффективной модели сводится как раз к отказу от информации о ненужных величинах.

Таким образом, эволюцию системы можно вычислить численно либо путем решения детерминированного дифференциального уравнения в частных производных (уравнения Колмогорова в обратном направлении), либо путем моделирования большого числа траекторий стохастического дифференциального уравнения. В публикации [9] обсуждается композитный способ дисперсионного моделирования с уменьшенной вариативностью Монте-

Карло. Композитный метод более эффективен, чем стандартный метод Monte Carlo или классический числовой метод.

Многие проблемы экологического моделирования связаны с решением стохастического дифференциального уравнения. Типичной задачей является описание эволюции загрязняющих веществ вследствие судовых аварий в прибрежных водах. Интерпретируя хорошо известное уравнение диффузии с массопереносом (адвективной диффузии) как уравнение Фоккера-Планка, можно вывести стохастическое дифференциальное уравнение для положения одной частицы загрязнителя в точке x в момент времени t [10]. Динамика X моделируется случайными блужданиями, которые, в общем, могут быть заданы стохастическим дифференциальным уравнением

$$dX_t = \alpha(t, X_t)dt + \sigma(t, X_t)dW_t \quad (2)$$

с начальным значением координат для каждой частицы. Путем аппроксимации вышеприведенного уравнения численно и путем моделирования положения многих частиц, используя генератор случайных чисел, может быть описан процесс диффузионного расплывания. Этот вариант подхода моделирования Монте-Карло дает полную картину проблемы распространения загрязнения и требует очень больших затрат времени на вычисления.

Однако на практике часто интересует только вероятность того, что загрязнитель достигает относительно небольшого числа критических регионов. Если f – индикаторная функция некоторой критической области, вероятность того, что загрязнитель достигнет этого региона в будущем времени T , обеспечивается оценкой математического ожидания

$$Ef(X_T^{\tau, x})$$

Напомним, что математическое ожидание некоей случайной величины ξ в процессе из N независимых реализаций рассчитывается по формуле:

$$\bar{\xi}_N = \left(\frac{1}{N}\right) \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (3)$$

При этом ожидаемая ошибка в определении математического ожидания будет:

$$Err_N = 0,6745 \sqrt{\frac{D\xi}{N}} \quad (4)$$

где $D\xi = M(\xi^2) - (M(\xi))^2$ – дисперсия случайной величины ξ .

Из формулы (4) видно, что вероятная ошибка оценки (3) пропорциональна $1/\sqrt{N}$. Скорость убывания этой ошибки с ростом N невелика. Поэтому очень важно научиться выбирать для расчета интегралов такие вычислительные схемы или, другими словами, такие случайные величины для которых дисперсия $D\xi$ по возможности мала.

В качестве общего «лекарства» для понижения дисперсии рекомендуется частичное аналитическое интегрирование, хотя в некоторых случаях такую же роль может сыграть частичное численное интегрирование. Если часть задачи можно решить аналитически, то, используя это частичное решение, обычно удастся построить метод Монте-Карло для решения всей задачи с дисперсией, меньшей, чем исходная. Правда, в общем случае, построенные таким путем методы могут оказаться более трудоемкими и, в конечном счете, невыгодными.

Из дальнейшего будет видно, что наш случай, т.е. решение задачи диффузии с массопереносом и возможной химической трансформацией, именно таким и является. Получаемые профили концентраций для заданного момента времени, равно как и кинетические кривые, т.е. зависимости от времени для заданных координат, могут иметь столь причудливую форму, что не оставляют ни малейшей надежды на возможность ее описания в аналитическом виде.

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ

В качестве среды для разработки и применения программного обеспечения по применению метода Монте-Карло мы остановили свой выбор на VBA – Excel, ввиду того что эта среда обладает изрядной гибкостью в онлайн настройке параметров модели и снабжена развитыми средствами графического отображения результатов.

Мы ограничились рассмотрением двумерных ландшафтов, поскольку введение третьей размерности сильно ухудшает возможности наглядного отображения событий, эффектов и явлений. В принципе, введение дополнительной пространственной координаты не представляет собой никаких новых сложностей, поскольку идеология модели достаточно проста. Хотя очевидно, что увеличение числа элементарных ячеек для расчета несколько увеличивает вычислительную емкость модели, однако не пропорционально их числу.

В защиту двумерной модели можно также добавить следующее. Мы не ставили себе задачи в этой работе охватить случаи «толстой атмосферы» с перемешиванием, равно как и глубинные эффекты, присущие обширным водоемам. Мы ограничились моделированием распространения залпового выброса загрязняющего вещества в пространстве двух измерений, которое можно характеризовать географической широтой и долготой и которое не требует рассмотрения дополнительного вертикального высотного/глубинного фактора. Действительно, если взять, к примеру, разлив нефтепродукта, то глубина его проникновения в почву редко превышает 20 см, тогда как горизонтальная протяженность может характеризоваться десятками километров. В случае аналогичного инцидента на поверхности водоема соотношение горизонтального и вертикального размеров пятна загрязнения еще более впечатляющее. При этом реальные перепады высот ландшафта, приводящие к перетокам, вызванным гравитационными силами, совсем необязательно моделировать введением третьей координаты. Достаточно задать поле векторов скоростей в плоской модели.

Поведение газообразных выбросов в атмосфере и их вертикальное перемешивание зависит от относительной плотности (температуры) их вещества – тяжелее или легче газ окружающего воздуха. При относительно легком газе ($\rho < \rho_{\text{воздуха}}$) выброс под действием силы тяжести устремляется вверх; при $\rho > \rho_{\text{воздуха}}$ – опускается к поверхности земли [11]. Так ведут себя тяжелые углеводородные газообразные топлива и многие токсичные газы (соединения хлора, фтора и других веществ).

Мы отдаем себе отчет, что в рамках любой математической модели высота вторичного атмосферного источника (фактически высота выброса в месте потери им динамической индивидуальности) является одним из основных параметров, влияющих на результаты расчета. Однако значительный класс задач позволяет отказаться от учета этого фактора.

Так или иначе, даже в руководящем документе [12] рекомендуется использовать в качестве локальной модели гауссову модель, которая позволяет рассчитывать распространение ЗВ на расстояниях не более 10 км от источника и делать ориентировочную экспресс-оценку переноса ЗВ на расстояния не более 30 км с высотой выброса менее 150 м. Химические превращения или радиоактивный распад ЗВ учитывается в виде реакций первого порядка без рассмотрения новых химических образований и дочерних радионуклидов.

Мы придерживались именно этой части рекомендаций. Более подробное обсуждение процессов вертикального переноса и их влияния на распространение пятна загрязнения явно выходит за рамки настоящей работы.

ВЫБОР ПЕРЕМЕННЫХ И ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ

В качестве объекта для имитационного моделирования выбирался ансамбль из N_dots частиц загрязнителя. Как правило, но не обязательно, мы использовали число частиц кратное степеням 2 и обычно находящееся в диапазоне от 1024 до 8192. Меньшее число частиц дает сильно зашумленную картину стохастических блужданий, тогда как большее неоправданно увеличивает потребляемое машинное время. Мы убедились в справедливости «микроэргодической гипотезы»: многократный прогон однотипной модели с одинаковыми параметрами дает результаты идентичные однократному прогону модели с числом частиц, равному общему, использованному в ходе накопления данных модели. Иными словами, восемь имитаций с ансамблем в 1024 частицы и по затратам машинного времени, и по качеству получаемого результата эквивалентны однократному использованию 8192 частиц. Надо, однако, отметить, что использование меньших ансамблей более привлекательно, поскольку практически сразу позволяет увидеть итоговую картину в общих чертах и далее вести накопительный вычислительный эксперимент до тех пор, пока пользователя не удовлетворит воспроизводимость и малая зашумленность получаемого результата.

Для каждой из частиц на каждом шаге имитации оценивались вероятности следующих событий: случайное блуждание по x , случайное блуждание по y , дрейф в поле скоростей и возможность химической

трансформации. Соответственно величина броуновского шага (по x и по y) задается коэффициентом диффузии D , дрейф значениями скоростей v_x и v_y .

После задания численности ансамбля, прежде всего, необходимо обозначить пространственно-временные границы модели, точнее определить разбиение по сетке и шаг по времени. «Театр военных действий» мы разбили на квадраты от $-R_x$ до $R_x - 1$ (включая 0, всего $2R_x$ целочисленных шагов) и от $-R_y$ до $R_y - 1$. Как показали численные эксперименты с моделью, разбиение сетки на 400 квадратов (20 по горизонтали и 20 по вертикали) $R_x = R_y = 10$, в большинстве случаев дает достаточное пространственное разрешение для получения адекватной кинетической картины.

Затем необходимо определить величину шага по времени. Опыт моделирования показывает, что сетка шагов по времени должна быть существенно меньшей, чем разбиение по пространству, что находится в полном соответствии с известным соотношением для случайных блужданий: $x \sim \sqrt{Dt}$. Так, при близком к единице значении параметра D для пространственной сетки $R_x = R_y = 10$ оказывается уместным число шагов по времени $N_{step} \sim 100 \div 400$.

Следует обратить внимание, что хотя параметр D и отвечает за величину шага случайных блужданий, т.е. имеет смысл коэффициента диффузии, он НЕ совпадает численно с физически определяемыми значениями, а лишь пропорционален диффузионной подвижности веществ. Действительно, слишком малые значения D (например, коэффициент диффузии водных растворов в чистой воде обычно имеет масштаб 10^{-9} м²/сек) потребовали бы астрономического числа расчетных шагов, чтобы получить ощутимые перемещения. Напротив, при значениях $D \geq 1$ каждый шаг по времени приводил бы к перемещению частицы на целую клетку или даже несколько клеток, что для модели пагубно. Поэтому при моделировании уместно использовать значения D из диапазона $[0,01; 0,5]$, при этом имея в виду, что привязка значений к определенному, удобному для вычислений диапазону, не является насильственным исправлением природных свойств материалов, а определяется исключительно масштабированием шага по времени. Вместо использования стандартных для СИ метров квадратных в секунду, в модели используются безразмерные единицы длины (действительное число в диапазоне $[-R_x; R_x - 1]$) и времени (целое число шагов в диапазоне $[0; N_{step}]$). И для привязки к любой конкретной системе необходимо масштабирование, при котором выбирается подходящий шаг по времени, «загоняющий» значение D в приемлемый диапазон.

Моделирование начинается с генерации пространственного распределения частиц после залпового выброса. В большинстве случаев мы следовали рекомендациям руководящего документа [12] и брали нормальное гауссово распределение частиц по обеим координатам x и y . Практически это было реализовано следующим образом. Штатный встроенный в Excel генератор случайных чисел вызывается функцией СЛЧИС() (в английской транскрипции RAND()) или в некоторых релизах RND()). Для того чтобы избежать

совершенно идентичных последовательностей псевдослучайных чисел, перед каждым циклическим обращением к генератору мы запускали однократное выполнение функции Randomize. Randomize может использовать параметр Number для инициализации генератора случайных чисел функции RAND, присвоив ему новое начальное значение. Мы применяли другую возможность случайной начальной инициации: если параметр Number оставить пустым, в качестве нового начального значения будет использоваться значение, возвращенное системным таймером.

Получаемые таким образом псевдослучайные числа находятся в открытом с двух сторон интервале (0;1) и распределены по интервалу равномерно. Для того, чтобы распределения координат имели нормальную гауссову форму следует использовать встроенную функцию Excel Norm_Inv() (или в русской транскрипции НОРМОБР()), а именно:

$$\xi = \text{WorksheetFunction.Norm_Inv}(\text{Rnd}(), \text{xx}_0, \text{sigma_x}),$$

где $\text{xx}_0 \in [-R_x; R_x - 1]$ задает центр распределения,

а sigma_x – среднеквадратичное отклонение, дающие распределение с плотностью вероятности:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (5)$$

Аналогичным образом поступаем и с распределением по координате y.

Полученное начальное распределение выброса представлено на рисунке 1.

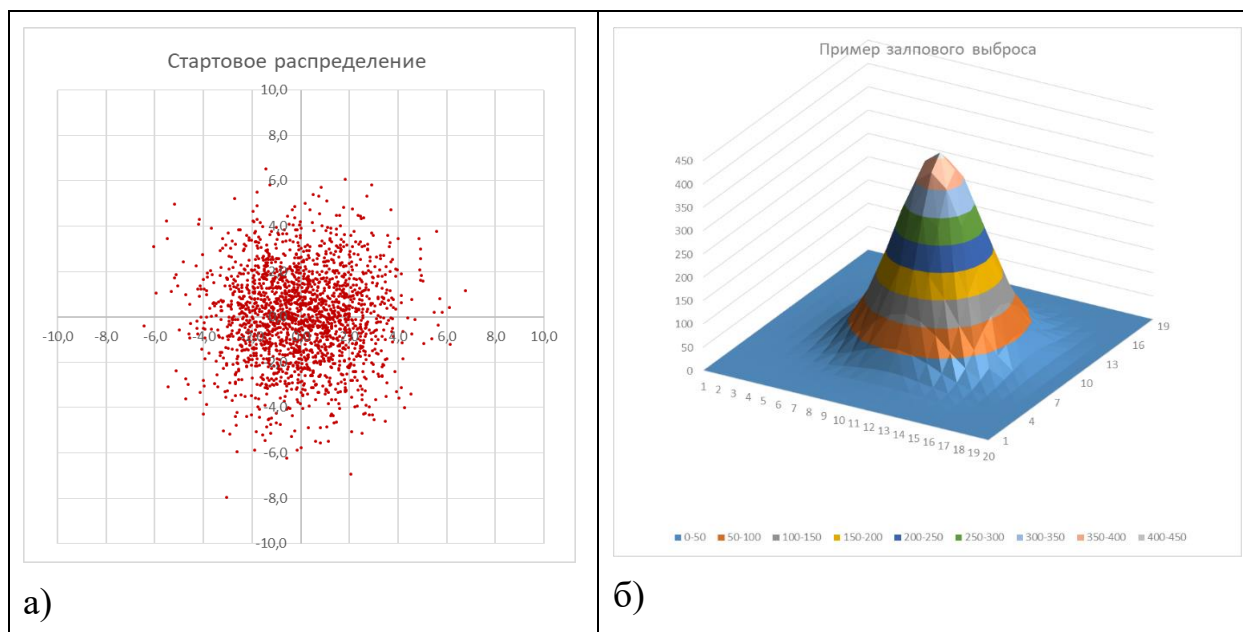


Рис. 1. Пример залпового выброса с нормальным распределением по координатам.

Fig. 1. Example of instantaneous release of contaminant with normal distribution along coordinates.

На вкладке а) показано двумерное представление; справа, на вкладке б) трехмерная диаграмма. Параметры модели представлены в таблице 1.

Таблица 1. Данные, использованные для генерации ансамбля на рис. 1

Table 1. Data used to generate the ensemble in Fig. 1

Rx	Ry	N_dots	N_step	sigma_x	sigma_y	xx_0	yy_0	D_	V_x	V_y	k_
10	10	16 384	150	2,00	2,00	0,00	0,00	~	~	~	~

Для моделирования дальнейшей эволюции системы, т.е. прогноза судьбы миграции и трансформации пятна загрязнения применялись следующие процедуры.

В момент времени $t = 0$ положение каждой i -й частицы ансамбля ($i = 1, 2, \dots, N_dots$) задавалось парой координат (x_i, y_i) .

На каждом шаге j по времени ($j = 1, 2, \dots, N_step$) вычислялись ожидаемые перемещения каждой частицы. Так, в результате диффузии точка не могла оставаться на месте и смещалась по x либо вправо с вероятностью $1/2$, либо с такой же вероятностью влево на величину D . Тем самым при больших D частица совершала крупные шаги и диффундировала быстро, а при малых D медленно; в пределе при $D = 0$ диффузионных перемещений не было вовсе. Решение о том, в какую сторону будет перемещена частица принималось на основании значения случайной величины $\xi = RND()$. При $\xi \geq 0,5$ считалось, что смещение происходит в положительном направлении, тогда как при $\xi < 0,5$ осуществлялся шаг влево.

Немедленно вслед за определением диффузионного смещения по абсциссе, точно такая же стохастическая процедура применялась для вычисления смещения по ординате. Важно отметить, что не было никакой необходимости приводить распределение величин шагов по абсциссе и ординате к нормальному гауссовому. Достаточно было использовать равномерное распределение $RND()$ и тот факт, что смещения в каждом направлении равновероятны. Недостатком такого подхода (очевидным) является то, что единственно возможными и даже обязательными к исполнению были смещения на один и тот же шаг по направлению под 45° к одной из декартовых осей координат (всего 4 выбираемых случайно направления). Зато несомненным достоинством оказался отказ от времязатратной процедуры приведения шага к гауссовому распределению, причем в сотнях тысяч повторов – на каждом шаге по времени для каждой из частиц.

Опыт использования модели показал, что лишь в редких случаях, когда параметр D превышает значение $\sim 0,5$ из-за выбранного упрощенного алгоритма диффузионная картина приобретает регулярный (т.е. заведомо неправильный) характер. Причем этих режимов легко избежать путем уменьшения D и пропорционального этому уменьшению увеличения числа шагов по времени. Более того, специально проведенные численные эксперименты показали, что равновероятные случайные блуждания неизбежно приводят к нормальному распределению даже в случае изначально не гауссового распределения.

После вычисления диффузионного смещения к нему добавляется (аддитивно) дрейф по x и по y . Эта процедура не требует вероятностной

оценки, просто на каждом шаге текущие координаты инкрементируются на v_x и v_y .

Наконец, проводится оценка вероятности химической деградации. После вычисления случайной величины $\xi = RND()$ идет ее сравнение с пороговым значением. Если $\xi > 1 - k_-$ (где k_- – псевдо мономолекулярная константа скорости химической реакции) координатам по x и по y независимо от их текущего значения присваивается значение Out, выводящее частицу за пределы поле наблюдения. В дальнейших операциях такая частица более участвовать не будет.

ТЕСТИРОВАНИЕ МОДЕЛИ - ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ

Разработанные программные средства позволяют отслеживать пространственно-временную эволюцию сгенерированного ансамбля частиц.

Для начала сопоставим результаты имитационного моделирования по Монте-Карло с аналогичными расчетами, сделанными в [1] по Крэнку-Николсону. Сначала проведем сопоставление элементарных, интуитивно осознаваемых однофакторных предельных случаев: чистый дрейф в отсутствие диффузии и химической трансформации; химическая деградация без диффузии и дрейфа; диффузионное расползание в отсутствие воздействия других факторов.

На рисунке 2 представлен чистый дрейф.

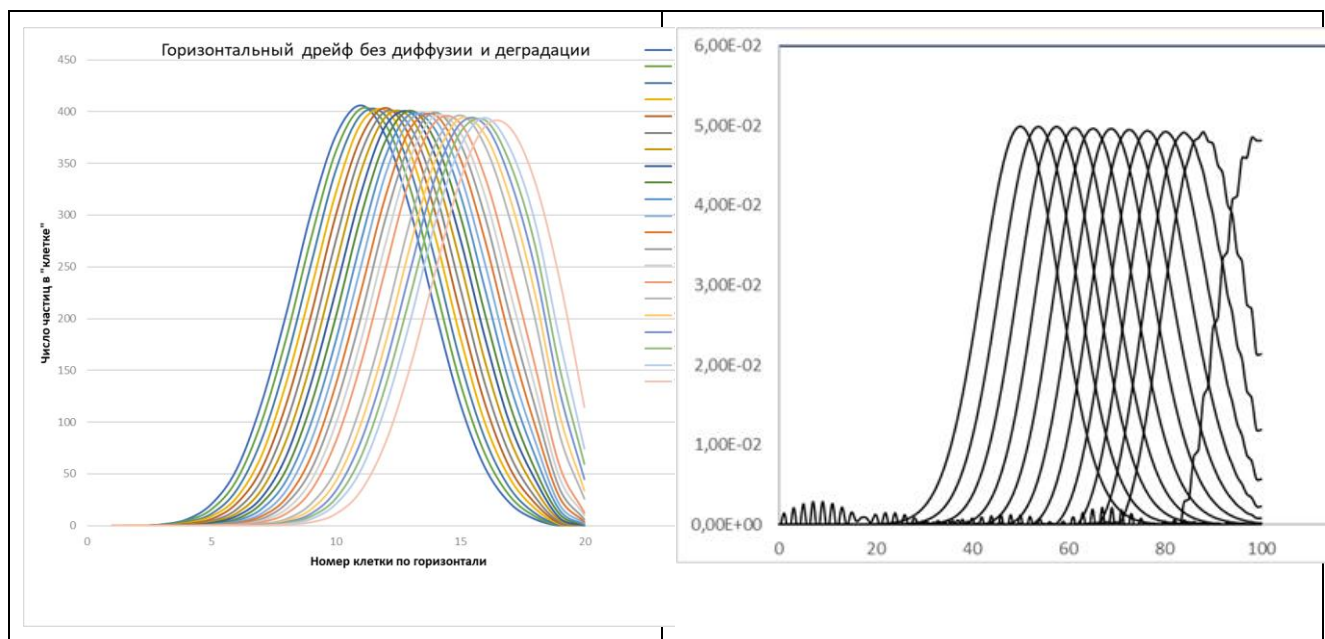


Рис. 2. Численное интегрирование миграции пятна загрязнения для случая отсутствия диффузии и химической деградации загрязнителя. Чистый дрейф при неизменной амплитуде и ширине пика. Слева – метод Монте-Карло, справа – диаграммы из [1]. Параметры моделирования по Монте-Карло представлены в нижележащей таблице 2.

Fig. 2. Numerical integration of pollution spot migration for the case of absence of diffusion and chemical degradation of pollutant. Pure drift with constant peak amplitude and width. Left – Monte Carlo method, right – diagrams from [1]. The Monte Carlo simulation parameters are given in Table 2 below.

Таблица 2. Данные, использованные для расчета динамики на рис. 2

Table 2. Data used to calculate the dynamics in Fig. 2

Rx	Ry	N_dots	N_step	sigma_x	sigma_y	xx_0	yy_0	D_	V_x	V_y	k_
10	10	16 384	150	2,00	2,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,05	0,00

Обращает на себя внимание то, что даже при применении неявной схемы численного интегрирования (устойчивой!) на больших временах эволюции появляются биения. Эволюция, полученная методом Монте-Карло от этого дефекта свободна.

На рисунке 3 представлена химическая деградация без диффузии и дрейфа.

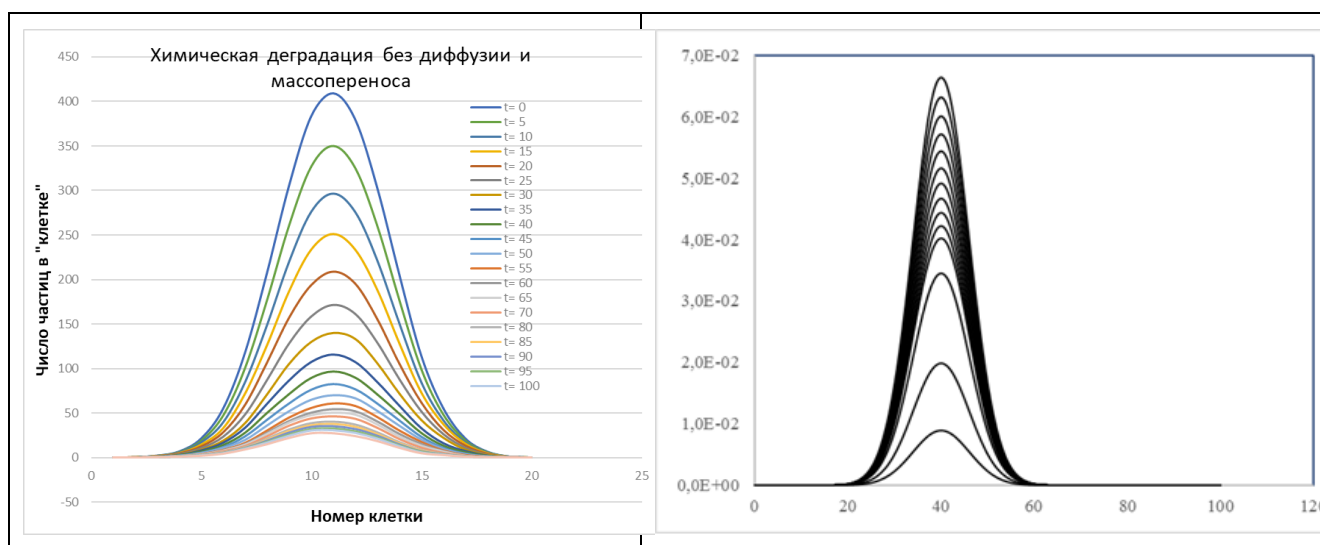

Рис. 3. Численное интегрирование деградации пятна загрязнения.

Fig. 3. Numerical integration of pollution spot degradation.

Методы и параметры – те же, что на рисунке 2, но отсутствуют диффузия и дрейф, а работает только химическая реакция первого порядка. Форма пространственного распределения загрязнителя изначально принята гауссовой. Слева – метод Монте-Карло, справа диаграммы из [1]. Параметры моделирования по Монте-Карло представлены в нижележащей таблице 3.

Таблица 3. Данные, использованные для расчета динамики на рис. 3

Table 3. Data used to calculate the dynamics in Fig. 3

Rx	Ry	N_dots	N_step	sigma_x	sigma_y	xx_0	yy_0	D_	V_x	V_y	k_
10	10	16 384	150	2,00	2,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03

На рис. 4 представлено диффузионное расползание в отсутствие воздействия других факторов. В этом случае специально (искусственно!) изначальное распределение загрязнителя задано не гауссовым, а прямоугольным.

Обращает на себя внимание то, что изначально прямоугольный профиль в ходе диффузии неизбежно приобретает форму гауссианы.

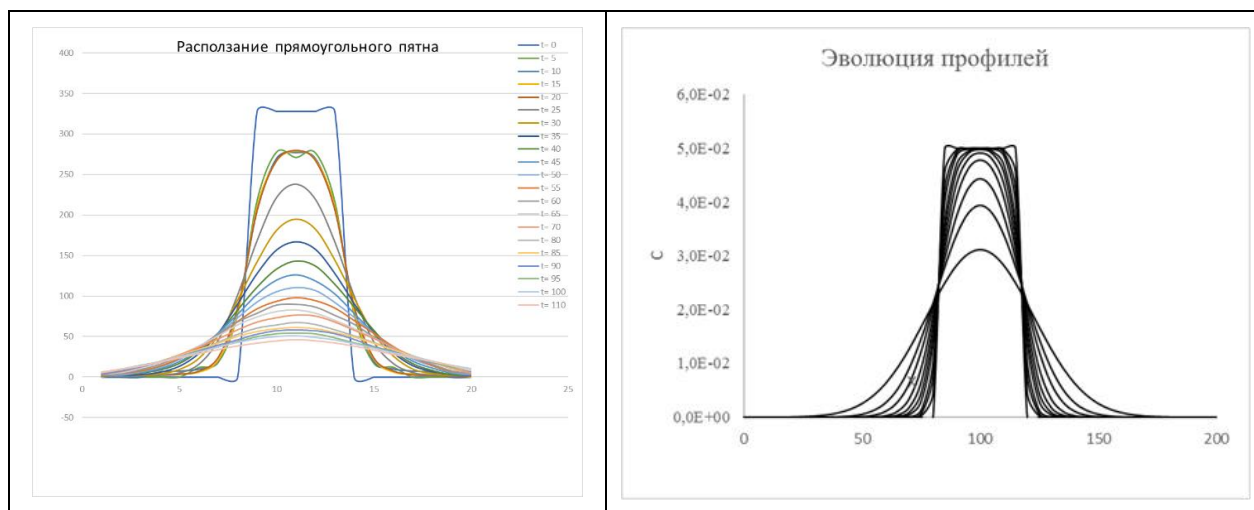


Рис. 4. Численное интегрирование диффузионного расплывания пятна загрязнения: слева – методом Монте-Карло, справа – методом тридиагонального прогона по схеме Крэнка-Николсона. Дрейф и химические превращения отсутствуют – площадь под кривыми, соответствующая общему количеству загрязнителя, сохраняется постоянной.

Fig. 4. Numerical integration of diffusion spreading of pollution spot: left – by Monte Carlo method, right – by tridiagonal run method according to the Crank-Nicolson scheme. There is no drift or chemical transformation – the area under the curves corresponding to the total amount of pollutant remains constant.

На рисунке 5 представлена эволюция системы под действием всех трех факторов: диффузии, дрейфа и химической деградации.

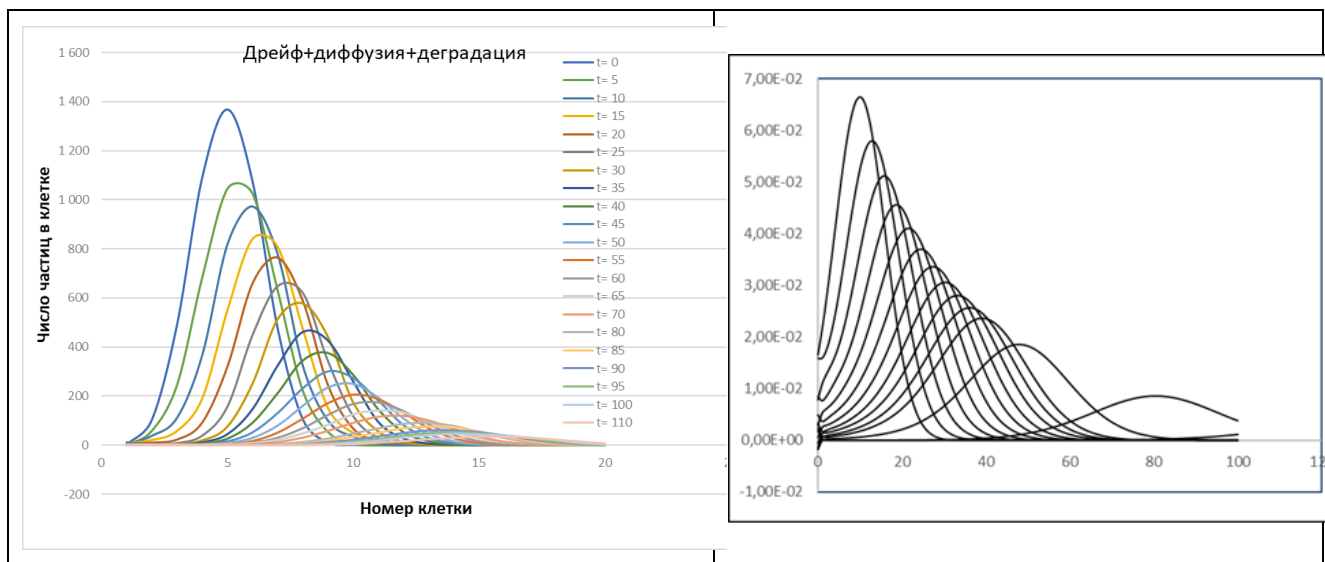


Рис. 5. Исчезновение пятна загрязнения при одновременном воздействии трех факторов – диффузии, дрейфа и химической деградации. Слева – решение, полученное по модели Монте-Карло, справа – рисунок из [1], полученный численным интегрированием по алгоритму Крэнка-Николсона. Параметры численного интегрирования те же, что и ранее. Значения параметров, входящих в модель Монте-Карло приведены в таблице 4.

Fig. 5. Disappearance of pollution spot under the simultaneous influence of three factors – diffusion, drift and chemical degradation. Left – solution obtained using Monte Carlo model, right – figure from [1], calculated by numerical integration using Crank-Nicolson algorithm. Numerical integration parameters are the same as before. The values of the parameters included in Monte Carlo model are given in Table 4.

Таблица 4. Данные, использованные для расчета динамики на рис. 5

Table 4. Data used to calculate the dynamics in Fig. 5

Rx	Ry	N_dots	N_step	sigma_x	sigma_y	xx_0	yy_0	D_	V_x	V_y	k_
10	10	16 384	150	1,00	1,00	0,00	-6,00	0,25	0,00	0,10	0,02

Сопоставление данных рисунках 2–5 показывает полную адекватность и работоспособность модели, основанной на имитации судьбы частиц загрязнителя. Для придания рисункам «парадного вида», сопоставимого с безоговорочно незашумленными профилями, получаемыми методом Крэнка-Николсона, мы использовали увеличенную численность ансамбля $N_dots = 16384$; время счета при этом для двумерной пространственной сетки 20×20 клеток и числе шагов по времени $N_step = 150$ составляет менее 8 с на настольном компьютере.

На самом деле, качество пространственных профилей остается приемлемым и при снижении численности ансамбля ниже 1024 точек. Так на рисунке 6 видно, что и для $N_dots = 256$ качество пространственной развертки остается приемлемым.

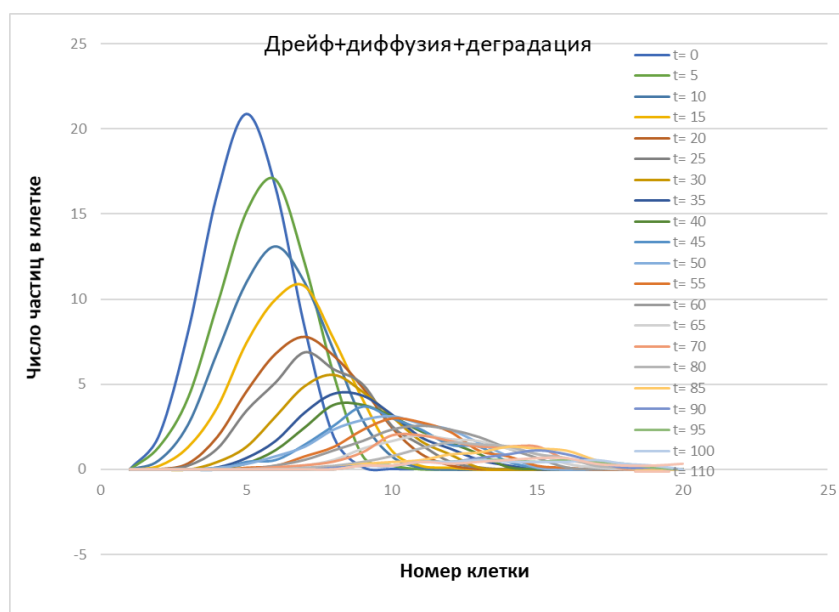


Рис. 6. Исчезновение пятна загрязнения при одновременном воздействии трех факторов (диффузии, дрейфа и химической деградации) – имитация для малого числа частиц $N_dots = 256$. Время счета при этом составляет 0,27 сек.

Fig. 6. Disappearance of pollution spot under simultaneous influence of three factors (diffusion, drift and chemical degradation) – simulation for small number of particles $N_dots = 256$. Counting time is 0.27 sec.

ВРЕМЕННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ – КИНЕТИКА

Простейший случай, который легко проверить – это эволюция системы под действием только химической деградации, без влияния факторов массопереноса. В этом случае есть все основания ожидать, что исчезновение вещества в любой выбранной клетке будет проходить по закону первого порядка:

$$N(t) = N_0 \exp(-k_- \cdot t) \quad (6)$$

На рисунке 7 представлены кинетическая кривая, полученная имитационным моделированием, и теоретическая кривая спада, рассчитанная по формуле (6) и подогнанная под имитацию методом наименьших квадратов (подгоночные параметры начальная амплитуда и константа скорости первого порядка).

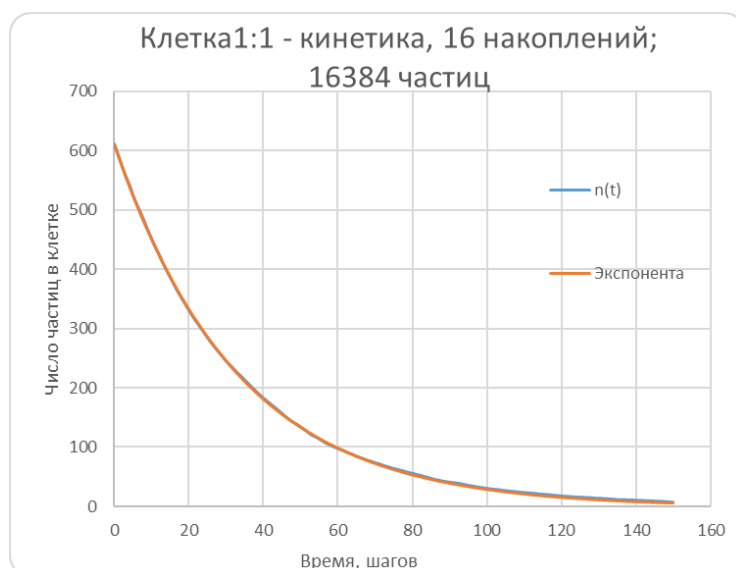


Рис. 7. Сопоставление кинетической кривой, полученной по методу Монте-Карло, с теоретической кинетической кривой. В модель заложена константа скорости деградации $k_- = 0,0300$.

Fig. 7. Comparison of kinetic curve obtained by Monte Carlo method with theoretical kinetic curve. The model contains the degradation rate constant $k_- = 0.0300$.

Фитинг по уравнению (6) дает значение $k_- = 0,0303$, отличающееся от ожидаемого менее, чем на 1%. Совпадение кривых практически идеальное. Время счета на настольном компьютере составило 10,5 с.

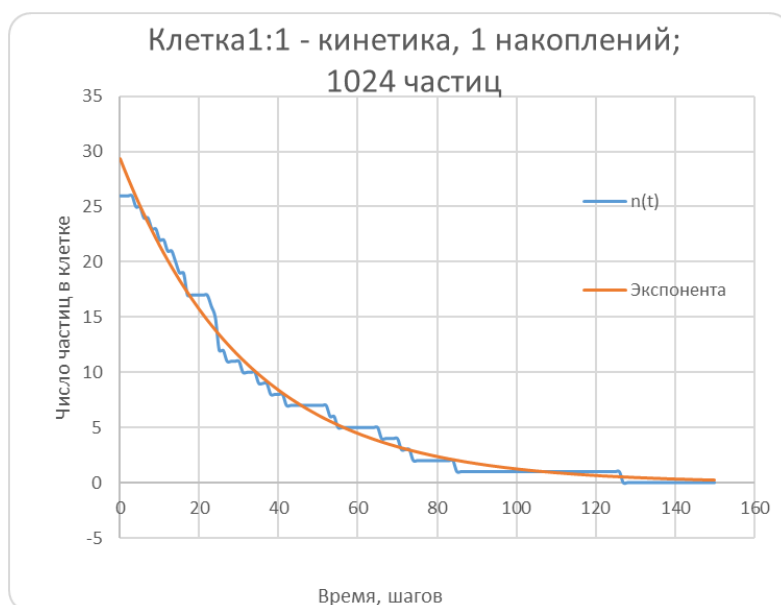


Рис. 8. Та же кривая, как на рисунке 7, но без накопления. Время счета 0,07 с.

Fig. 8. The same curve as in Fig. 7 but without accumulation. Counting time 0.07 s.

Такая тщательность подгонки для большинства практических задач явно избыточна. На следующем рисунке 8 представлена та же эволюция, но для более малочисленного ансамбля и без накопления сигнала.

Фитинг по уравнению (6) дает значение $k_- = 0,0313$, отличающееся от ожидаемого примерно на 4%, что превосходит точность практически любого натурального эксперимента.

В случае диффузионного расползания пятна «хорошего» уравнения кинетической кривой не существует. Тем не менее, неплохую аппроксимацию дает уравнение кривой второго порядка:

$$N(t) = \frac{N_0}{1 + N_0 k_- \cdot t} \quad (7)$$

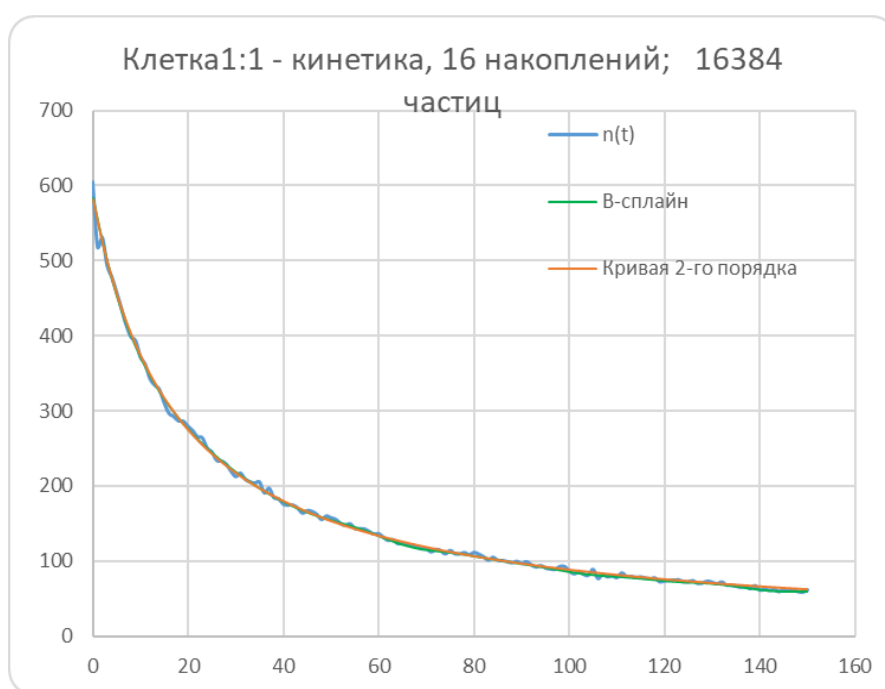


Рис. 9. Аппроксимация динамики диффузионного расползания пятна с помощью кинетической кривой второго порядка.

Fig. 9. Approximation of dynamics of diffusion spreading of spot using kinetic curve of the second order.

Хотя физического смысла в этом никакого, это скорее забавное совпадение, но качества подгона весьма высокое. Заметим, что сдвиг «против ветра» по координатной сетке для точки наблюдения относительно начального выброса пятна загрязнения может дать кинетическую кривую, весьма близкую к прямолинейному спаду, т.е. формально соответствующую реакции нулевого порядка. Надо, правда, отметить, что для периферических клеток динамика принципиально другая. Она едва ли может быть аппроксимирована степенной кривой спада. На рисунке 10 представлена пара таких кривых для различных клеток.

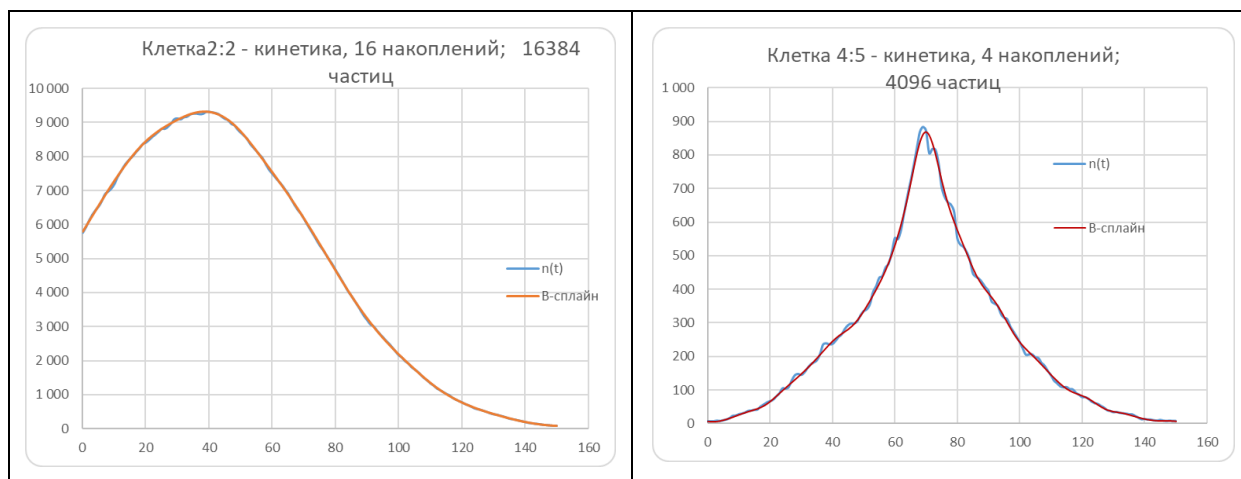


Рис. 10. Кинетические кривые для различных точек ландшафта могут принимать самые разнообразные, порой причудливые формы.

Fig. 10. Kinetic curves for different points of the landscape can have a variety of bizarre forms.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В сравнительно недавней работе [13] изложен новый подход к применению метода Монте-Карло к исследованию пространственно-временной динамики химических выбросов в окружающую среду.

Авторы работы [13] отмечают три фундаментальных исследовательских вопроса, которые побудили их разработать этот целостный подход к оценке пространственно-временной динамики управляющих параметров в распределенных моделях окружающей среды:

1. Каковы чувствительные параметры модели в пространстве и времени в области модели?
2. Как взаимодействие параметров влияет на поведение модели?
3. Как результаты зависят от выбора диапазонов параметров?

В модели оценивались данные за период с 22 августа по 04 октября 2012 года с часовым шагом по времени (всего 1032 точки). Были интерполированы данные (часовые осадки, температура воздуха и относительная влажность) с семи метеорологических станций вокруг исследуемого водосбора с разрешением сетки 1 км x 1 км над исследуемой областью с использованием комбинированного обратного взвешивания расстояния и линейной регрессионной сетки.

Авторы не указывают использованные вычислительные ресурсы, но, судя по всему, они огромны. И применение метода Монте-Карло в данном случае нам представляется всего лишь небольшим украшением к огромной вычислительной процедуре, использованной для моделирования.

Еще большие ресурсы были задействованы для модели CHIMERE. Согласно [14], тропосферные следы газовых и аэрозольных загрязнителей оказывают неблагоприятное воздействие на здоровье человека, окружающую среду и климат. С этим трудно не согласиться. Для количественной оценки и смягчения таких последствий необходимо рассмотреть, понять и представить в численных моделях широкий спектр процессов, ведущих к образованию и переносу загрязнителей.

Химико-транспортная модель CHIMERE [15] была предложена еще в 2004 г. Она специально разработана для региональных исследований загрязнения атмосферы. Модель потребляет примерно 1 ч 30 мин времени вычислений на одном АМД узле 64-разрядной 16 процессорной вычислительной машины для моделирования 1 месяца для района Парижа с разрешением 15 км, размер домена составляет $45 \times 48 \times 8$ с временным шагом в среднем 360 с (7200 шагов по времени).

Заметим, что наша гораздо более скромная модель, по крайней мере, по параметрам сетки имеет сопоставимые или близкие показатели: мы используем пространственную сетку $20 \times 20 \times 1$ (сознательно отказавшись на этом этапе от вертикальной координаты) и она может быть легко расширена до показателей Химеры. Что касается кинетических вычислений, мы обычно используем от 150 до 250 шагов по времени и для получения качественных кинетических кривых запускаем иногда до 128 прогонов ($128 \times 250 = 3200$).

CHIMERE использует схему распределенной памяти и библиотеку передачи сообщений MPI (Message Passing Interface Standard). Модель поддерживается для открытого MPI (рекомендуется) и LAM/MPI (Local Area Multicomputer), но работает, с незначительными изменениями в скриптах, с альтернативными или другими вычислительными сетями, совместимыми для параллельных вычислений. Параллелизм модели является результатом декартова разделения главной географической области на несколько поддоменов, каждый из которых обрабатывается рабочим процессом.

В качестве разумной альтернативы для этих моделей, требующих огромных вычислительных ресурсов мы предложили простую и эффективную схему, легко реализуемую на любом персональном компьютере и дающую осмысленные результаты в считанные секунды.

При этом понятно, что для получения полноценной пространственно-временной модели еще необходимо масштабирование. И, конечно, желательна привязка «театра военных действий» с полем векторов скоростей переноса и коэффициентов диффузии к какой-либо геоинформационной системе. Пока же все модели получаются без привязки к конкретной местности на абстрактной сетке.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Таким образом, в относительно короткий срок разработаны мощные современные средства программной поддержки и математической обработки данных по динамике распространения и трансформации загрязняющих веществ в природных условиях – разработан программный инструментальный для применения метода Монте-Карло к решению задач пространственно-временной динамики. Предложенная модель проста и эффективна, легко реализуется на любом персональном компьютере и дает осмысленные результаты в считанные секунды.

Список литературы:

1. Травин С.О., Скурлатов Ю.И., Рощин А.В. (2020). Возможности и ограничения математических моделей прогнозирования экологической безопасности. *Химическая физика*, 39(2), 3 - 17. DOI: [10.31857/S0207401X20020144](https://doi.org/10.31857/S0207401X20020144)
2. Mackay D., Paterson S., Cheung B., Neely W.B. (1985). Evaluating the environmental behavior of chemicals with a level III fugacity model. *Chemosphere*, 14(3-4), 335 - 374. [https://doi.org/10.1016/0045-6535\(85\)90061-X](https://doi.org/10.1016/0045-6535(85)90061-X)
3. Citra M.J. (2004). Incorporating Monte Carlo analysis into multimedia environmental fate models. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 23(7), 1629 - 1633. <https://doi.org/10.1897/03-516>
4. Li X., Zhang X., Hadjisophocleous G. (2019). A Monte Carlo-based probabilistic barrier failure model for arbitrary fire environment. *Fire Technology*, 55, 1319 - 1347. <https://doi.org/10.1007/s10694-018-0780-5>
5. Пригожин И. (1985). От существующего к возникающему: Время и сложность в физических науках. М.: Наука.
6. Соболев И.М. (1973). *Численные методы Монте-Карло*. М.: ФИЗМАТЛИТ.
7. Sobol' I.M. (1967). On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 7(4), 86 - 112. [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(67\)90144-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(67)90144-9)
8. Sobol I.M. (1976). Uniformly distributed sequences with an additional uniform property. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 16(5), 236 - 242. [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(76\)90154-3](https://doi.org/10.1016/0041-5553(76)90154-3)
9. Schoenmakers J.G.M., Heemink A.W., Ponnambalam K., Kloeden P.E. (2002). Variance reduction for Monte Carlo simulation of stochastic environmental models. *Applied Mathematical Modelling*, 26(8), 785 - 795. [https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(01\)00091-9](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(01)00091-9)
10. Heemink A.W. (1990). Stochastic modelling of dispersion in shallow water. *Stochastic Hydrology and Hydraulics*, 4(2), 161 - 174. <https://doi.org/10.1007/BF01543289>
11. Романов В.И. (2006). *Прикладные аспекты аварийных выбросов в атмосферу. Справочное пособие*. М.: Физматкнига.
12. РД 52.18.717-2009. Методика расчета рассеяния загрязняющих веществ в атмосфере при аварийных выбросах. Руководящий документ. Дата введения 2009-12-01. Разработан Государственным учреждением «Научно-производственное объединение «Тайфун» (ГУ НПО «Тайфун»).
13. Chen Z., Hartmann A., & Goldscheider N. (2017). A new approach to evaluate spatiotemporal dynamics of controlling parameters in distributed environmental models. *Environmental Modelling & Software*, 87, 1 - 16. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2016.10.005>
14. Menut L., Bessagnet B., Khvorostyanov D., Beekmann M., Blond N., Colette A., Coll I., Curci G., Foret G., Hodzic A., Mailler S., Meleux F., Monge J.-L., Pison I., Siour G., Turquety S., Valari M., Vautard R., & Vivanco M.G. (2013). CHIMERE 2013: a model for regional atmospheric composition modeling. *Geosci. Model Dev.*, 6, 981 - 1028, <https://doi.org/10.5194/gmd-6-981-2013>
15. Bessagnet B., Hodzic A., Vautard R., Beekmann M., Cheinet S., Honoré C., Lioussé C., Rouil L. (2004). Aerosol modeling with CHIMERE - preliminary evaluation at the continental scale. *Atmospheric Environment*, 38(18), 2803 - 2817. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.02.034>

References:

1. Travin, S.O., Skurlatov, Yu.I., & Roshchin, A.V. (2020). Capabilities and limitations of mathematical models in ecological safety forecasting. *Russian Journal of Physical Chemistry B*, 14(1), 86 - 99. <https://doi.org/10.1134/S1990793120010315>

2. Mackay, D., Paterson, S., Cheung, B., & Neely, W.B. (1985). Evaluating the environmental behavior of chemicals with a level III fugacity model. *Chemosphere*, 14(3-4), 335 - 374.
[https://doi.org/10.1016/0045-6535\(85\)90061-X](https://doi.org/10.1016/0045-6535(85)90061-X)
3. Citra, M.J. (2004). Incorporating Monte Carlo analysis into multimedia environmental fate models. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 23(7), 1629 - 1633.
<https://doi.org/10.1897/03-516>
4. Li, X., Zhang, X., & Hadjisophocleous, G. (2019). A Monte Carlo-based probabilistic barrier failure model for arbitrary fire environment. *Fire Technology*, 55, 1319 - 1347.
<https://doi.org/10.1007/s10694-018-0780-5>
5. Prigozhin, I. (1985). *From Existing to Emerging: Time and Complexity in the Physical Sciences*. M.: Nauka (in Russ.).
6. Sobol', I.M. (1973). *Numerical Monte Carlo Methods*. M.: Fozmatlit (in Russ.).
7. Sobol' I.M. (1967). On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 7(4), 86 - 112.
[https://doi.org/10.1016/0041-5553\(67\)90144-9](https://doi.org/10.1016/0041-5553(67)90144-9)
8. Sobol, I.M. (1976). Uniformly distributed sequences with an additional uniform property. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 16(5), 236 - 242.
[https://doi.org/10.1016/0041-5553\(76\)90154-3](https://doi.org/10.1016/0041-5553(76)90154-3)
9. Schoenmakers, J.G.M., Heemink, A.W., Ponnambalam, K., & Kloeden, P.E. (2002). Variance reduction for Monte Carlo simulation of stochastic environmental models. *Applied Mathematical Modelling*, 26(8), 785 - 795. [https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(01\)00091-9](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(01)00091-9)
10. Heemink, A.W. (1990). Stochastic modelling of dispersion in shallow water. *Stochastic Hydrology and Hydraulics*, 4(2), 161 - 174. <https://doi.org/10.1007/BF01543289>
11. Romanov, V.I. (2006). *Applied aspects of accidental emissions into the atmosphere. Reference book*. M.: Fizmatkniga (in Russ.).
12. Methodology for calculating dispersion of pollutants in the atmosphere during accidental emissions. RD 52.18.717-2009. Guiding document. Date of introduction 2009-12-01. Developed by the State Institution Research and Production Association 'Taifun' (in Russ.).
13. Chen, Z., Hartmann, A., & Goldscheider, N. (2017). A new approach to evaluate spatiotemporal dynamics of controlling parameters in distributed environmental models. *Environmental Modelling & Software*, 87, 1 - 16. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2016.10.005>
14. Menut, L., Bessagnet, B., Khvorostyanov, D., Beekmann, M., Blond, N., Colette, A., Coll, I., Curci, G., Foret, G., Hodzic, A., Mailler, S., Meleux, F., Monge, J.-L., Pison, I., Siour, G., Turquety, S., Valari, M., Vautard, R., & Vivanco, M.G. (2013). CHIMERE 2013: a model for regional atmospheric composition modeling. *Geosci. Model Dev.*, 6, 981 - 1028,
<https://doi.org/10.5194/gmd-6-981-2013>
15. Bessagnet, B., Hodzic, A., Vautard, R., Beekmann, M., Cheinet, S., Honoré, C., Lioussé, C., & Rouil, L. (2004). Aerosol modeling with CHIMERE - preliminary evaluation at the continental scale. *Atmospheric Environment*, 38(18), 2803 - 2817.
<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.02.034>