

М.М. Біляєв  
В.В. Біляєва  
П.С. Кіріченко

# МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ДНІПРОПЕТРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ЗАЛІЗНИЧНОГО ТРАНСПОРТУ  
ІМЕНІ АКАДЕМІКА В. ЛАЗАРЯНА

**М. М. Біляєв**  
**В. В. Біляєва**  
**П. С. Кіріченко**

# **МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ**

**Підручник**  
**ДЛЯ СТУДЕНТІВ ВИЩИХ НАВЧАЛЬНИХ ЗАКЛАДІВ**

Кривий Ріг  
Видавець Роман Козлов  
2016

УДК 504.1:519.673-047.72

ББК 20.18

Б 61

*Рекомендовано*

*до друку Вченою Радою Дніпропетровського національного університету  
залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна*

*Рецензенти:*

**Поліщук С. З.**, доктор технічних наук, професор,  
Придніпровська державна академія будівництва та архітектури.

**Савін Л. С.**, доктор технічних наук, професор,  
Придніпровська державна академія будівництва та архітектури.

**Петренко В. Д.**, доктор технічних наук, професор,  
Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту  
імені академіка В. Лазаряна.

**Біляєв М. М.**

**Б61**     **Моделювання і прогнозування стану довкілля** : підручник для студентів вищих навчальних закладів / М. М. Біляєв, В. В. Біляєва, П. С. Кіріченко ; Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна МОН України. — Кривий Ріг : Вид. Р. А. Козлов, 2016. — 207 с.

ISBN 978-617-7104-61-1

У підручнику розглянуто математичні моделі прогнозування ступеня забруднення навколишнього середовища. Наведено математичні моделі прогнозування стану довкілля у випадку техногенних аварій.

Для студентів вищих навчальних закладів.

УДК 505.054(075)

ББК 20.1я73

ISBN 978-617-7104-61-1

© М. М. Біляєв, В. В. Біляєва, П. С. Кіріченко, 2016.

# ЗМІСТ

<b>ВСТУП</b> .....	<b>6</b>
<b>РОЗДІЛ 1 МОДЕЛЮВАННЯ ЯКОСТІ ПОВІТРЯНОГО СЕРЕДОВИЩА</b> .....	<b>7</b>
1.1 Види прогнозів у галузі охорони навколишнього середовища .....	7
1.2 Фізичне моделювання процесів забруднення повітряного середовища .....	9
1.3 Види математичних моделей .....	14
1.4 Модель масоперенесення домішки в повітряному середовищі .....	21
1.5 Моделювання тривимірного перенесення домішки в атмосфері .....	24
1.6. Прогнозування трансграничного перенесення домішок в атмосфері .....	34
1.7 Розрахунок висоти підйому струменя від джерела забруднення .....	42
1.8 Гауссові моделі .....	45
1.9 Статистичні моделі .....	51
1.10 Прогнозування якості повітряного середовища на вулицях .....	53
1.11 Розрахунок якості повітря при низьких викидах домішок .....	60
1.12 Прогнозування забруднення повітряного середовища біля автомагістралей .....	67
1.13 Методика ОНД-86 .....	69
1.14 Модель Сеттона .....	75
1.15 Моделювання поширення шкідливих речовин у виробничих приміщеннях .....	76
1.16 Розрахунок забруднення атмосфери при штилі .....	83
1.17 Прогнозування шумового забруднення атмосфери біля транспортних магістралей .....	84
Література .....	87

<b>Розділ 2 ВИБІР МІСЦЯ ОПТИМАЛЬНОГО РОЗТАШУВАННЯ</b>	
<b>ПІДПРИЄМСТВА .....</b>	<b>91</b>
2.1 Прямі методи вибору місця будівництва підприємства .....	91
2.2 З'єднувальна задача при виборі можливого місця розташування нового підприємства.....	95
Література .....	102
<b>Розділ 3 МОДЕЛЮВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ ПРИ АВАРІЯХ .....</b>	<b>103</b>
3.1 Прогнозування забруднення атмосфери при аварійному викиді небезпечної речовини .....	103
3.2 Прогнозування впливу вибухів на об'єкти.....	106
3.3 Розрахунок теплового випромінювання вогняної кулі.....	107
3.4 Прогнозування величини підвищеного тиску при вибуху в приміщенні.....	109
3.5 Моделювання ступеня забруднення повітря в робочому приміщенні після аварії.....	111
3.6 Розрахунок ураження при вибуху хмари газопароповітряної суміші .....	113
3.7 Моделювання радіоактивного забруднення атмосфери при аваріях на АЕС .....	116
3.8 Прогнозування потенційної небезпеки при руйнуванні резервуарів, що знаходяться під тиском .....	118
3.9 Прогнозування забруднення атмосферного повітря в масштабі «Local» на базі кінематичної чисельної моделі .....	120
3.10 Прогнозування забруднення атмосферного повітря в масштабі «microscale» на базі CFD моделі .....	124
3.11 CFD моделювання якості повітряного середовища в приміщенні при аварійній емісії небезпечної речовини.....	130
Література .....	135
<b>Розділ 4 ПРОГНОЗУВАННЯ ЯКОСТІ ПОВЕРХНЕВИХ ВОД .....</b>	<b>137</b>
4.1 Модель перенесення домішок по руслу річки .....	137
4.2 Експрес-методики розрахунку якості поверхневих вод .....	141
4.3 Визначення концентрації домішок у річках при аварійному скиданні стічних вод .....	146
4.4 Скидання стічних вод у водоймище вдалині від берега .....	148

4.5 Забруднення поверхневого шару моря при залповому скиданні .....	150
4.6 Розсіювання домішок у морі від постійного джерела забруднення .....	151
4.7 Чисельне моделювання процесу забруднення моря .....	151
Література .....	154
<b>Розділ 5 Прогнозування процесів забруднення підземних вод ....</b>	<b>156</b>
5.1 Модель геоміграції .....	156
5.2 Фізичні параметри, що визначають процес міграції домішок .....	166
Література .....	167
<b>Розділ 6 Чисельне моделювання процесів забруднення підземних вод .....</b>	<b>170</b>
6.1 Неявна різницева схема для чисельного інтегрування двовимірного рівняння геоміграції .....	170
6.2 Експрес-методики розв'язання задач геоміграції .....	176
6.3 Чисельне моделювання процесу захисту від забруднення підземних вод .....	179
Література .....	182
<b>Розділ 7 Прогнозування стану довкілля у випадку природних катаклізмів .....</b>	<b>184</b>
7.1 Розрахунок швидкості вітру при торнадо та грозовій бурі .....	184
7.2 Моделювання підтоплення територій при паводках .....	186
7.3 Прогнозування висоти хвиль у морі .....	188
7.4 Прогнозування ймовірності руйнування об'єктів після землетрусу .....	189
7.5 Прогнозування пожежної небезпеки .....	191
Література .....	193
<b>Додаток 1 Завдання для самостійної роботи .....</b>	<b>194</b>
<b>Додаток 2 Перелік рекомендованих лабораторних робіт .....</b>	<b>204</b>
<b>Додаток 3 Контрольні питання .....</b>	<b>207</b>

*Пам'яті  
професора  
Віктора Кузьмича Хруща*

## **ВСТУП**

Сучасні вимоги щодо професійної підготовки екологів включають володіння математичними методами прогнозу стану довкілля під дією як техногенних, так і природних факторів.

Математичне моделювання має забезпечити формування цілісного екологічного знання й мислення, необхідних для прийняття екологічно-обґрунтованих народногосподарських рішень на рівні підприємств, галузей, регіонів, країни загалом.

У підручнику велика увага приділена питанню математичного моделювання процесів забруднення навколишнього середовища, як при організованих викидах забруднюючих речовин так і при надзвичайних ситуаціях.

Матеріал викладено таким чином, щоб читач міг оволодіти навиками самостійного рішення конкретних прикладних задач, пов'язаних з проблемами забруднення навколишнього середовища.

# Розділ 1

## МОДЕЛЮВАННЯ ЯКОСТІ ПОВІТРЯНОГО СЕРЕДОВИЩА

### 1.1 Види прогнозів у галузі ОХОРОНИ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

**Прогнозування** — це визначення майбутніх, можливих параметрів об'єкта, явища (наприклад, рівня забруднення навколишнього середовища на проммайданчику) при заданих вхідних даних (швидкості вітру, його напрямку, потужності викиду джерела тощо).

Прогнозування базується на основі створеної моделі об'єкта. Процес створення моделі, її налаштування, оцінювання величини похибки й розв'язання на її основі прогнозних задач називається **моделюванням**. Існують різні види моделювання, які розглядатимуться нижче. Вибір того чи іншого виду моделювання обумовлений низкою факторів:

1. Кваліфікацією дослідника.
2. Метою, завданнями прогнозу.
3. Необхідною точністю прогнозу.
4. Часом на створення моделі та одержання з її допомогою прогнозних даних.
5. Повнотою інформації, необхідної для прогнозу.
6. Наявністю, станом і рівнем експериментального обладнання.
7. Наявністю комп'ютерної бази, необхідного ліцензованого програмного забезпечення.

Прогнози в галузі охорони навколишнього середовища, з погляду часового чинника, можуть бути:

- *короткостроковими* – це прогнози на декілька годин, діб (наприклад, прогноз рівня забруднення атмосферного повітря на конкретних вулицях міста на наступний день);
- *довгостроковими* – це прогнози на декілька років, десятиліть (наприклад, прогноз рівня CO в атмосфері планети на середину 3 тисячоліття).



З іншого боку, на практиці, дуже часто необхідний прогноз на конкретну ситуацію, типу «що буде, якщо...?» У закордонній літературі такий прогноз називається «*what-if scenario*». Такі сценарії характерні для задач в області екологічної безпеки, пов'язаних з аваріями, диверсіями на хімічно небезпечних об'єктах, транспорті тощо. Наприклад, який очікується рівень забруднення атмосферного повітря в селітебній зоні, якщо на підприємстві *N* буде аварійний викид аміаку в кількості 60 т? Такий прогноз є основою при розробленні ПЛАСу (план ліквідації аварійної ситуації). Даний документ створюється для всіх хімічно небезпечних об'єктів. У випадку сценарію «*what-if*», ми не знаємо, коли буде викид токсичної речовини на підприємстві (тобто ми не знаємо за яких метеоумов буде мати місце розповсюдження небезпечної речовини), але такий прогноз необхідний для визначення зон ураження та розроблення захисних заходів.

Крім цього, розроблення моделей для розрахунку розсіювання забруднювальних речовин в атмосфері зазвичай здійснюється з урахуванням масштабу переносу. У даний час виділяють такі масштаби переносу:

1. *Canopy* — масштаб перенесення на рівні висоти трави, кущів тощо.

2. *Microscale* — масштаб перенесення порядку декількох десятків метрів.

3. *Local* — масштаб перенесення порядку декількох сотень метрів.

4. *Urban* — масштаб перенесення близько 10 кілометрів.

5. *County* — масштаб перенесення порядку 20–30 кілометрів.

6. *Regional* — масштаб перенесення від декількох десятків до сотень кілометрів.

7. *Transboundary* — масштаб перенесення сотень, тисяч кілометрів.

Наявність таких різних видів прогнозів вимагає їх урахування при розробленні конкретних математичних моделей.

## 1.2 ФІЗИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ЗАБРУДНЕННЯ ПОВІТРЯНОГО СЕРЕДОВИЩА

**Фізичне моделювання** — моделювання на базі фізичної моделі, що являє собою вихідний об'єкт у зменшеному чи збільшеному вигляді. При розв'язанні завдань, пов'язаних з поширенням забруднювальних речовин у повітряному середовищі широко використовуються аеродинамічні труби (рис. 1.1, 1.2), рідше — гідравлічні лотоки (рис. 1.3). Це обладнання застосовують при розв'язанні завдань аеродинаміки, переносу домішки в умовах забудови, складного рельєфу місцевості (рис. 1.4–1.8).

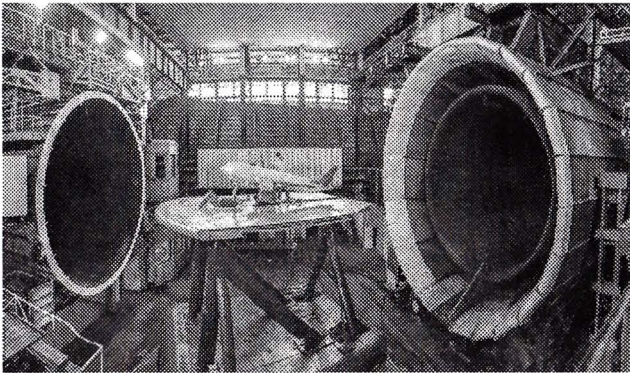


Рис. 1.1 — Підготовка до фізичного експерименту в аеродинамічній трубі.  
<http://www.kommersant.ru/doc/2595498>

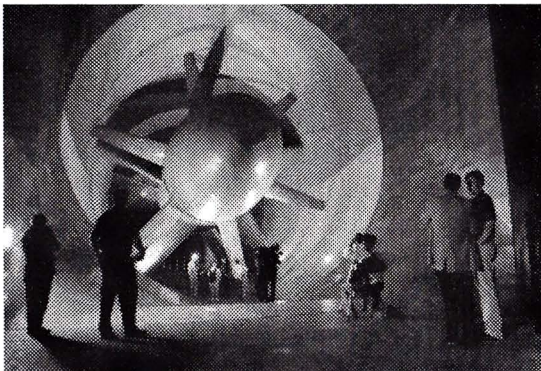


Рис. 1.2 — Аеродинамічна труба.  
<http://www.epochtimes.ru/content/view/70657/69>

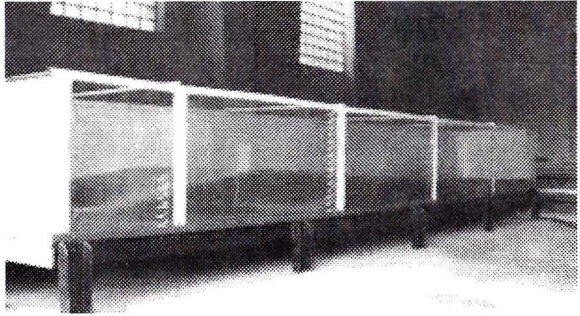


Рис. 1.3 — Гідравлічний лоток

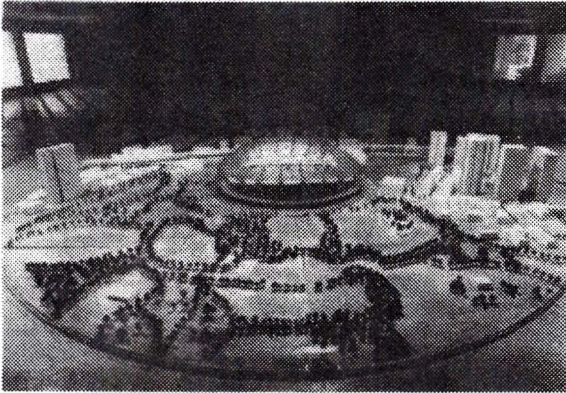


Рис. 1.4 — Модель стадіону та прилеглої території, розміщена в аеродинамічній трубі [39]

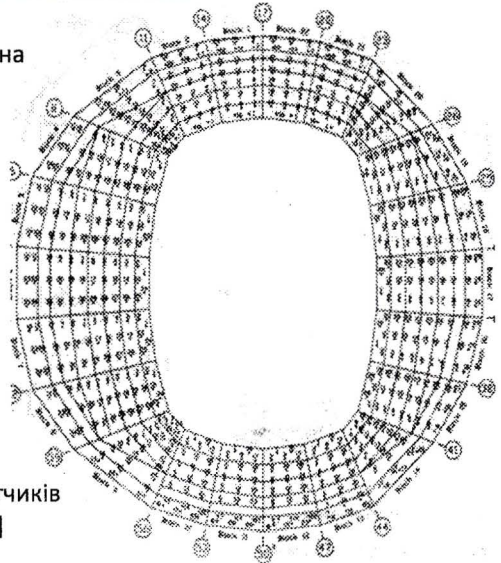


Рис. 1.5 — Схема розміщення датчиків на даху моделі стадіону [39]



Рис. 1.6 — Модель місцевості зі складною топографією, яка розташовується в аеродинамічній трубі [27]

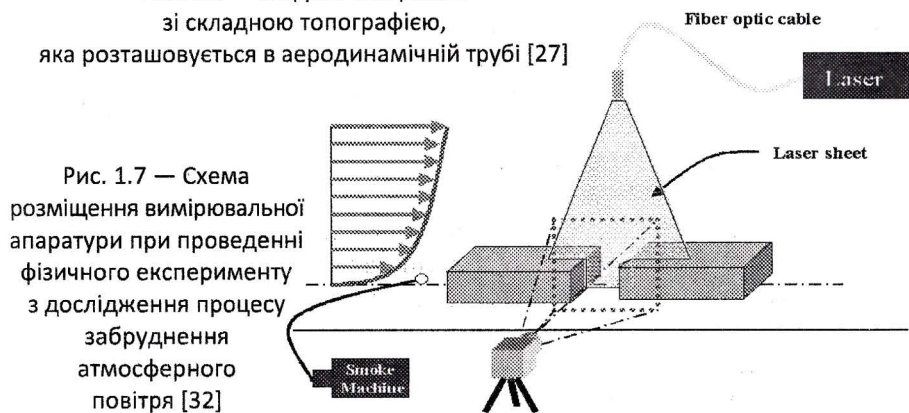


Рис. 1.7 — Схема розміщення вимірювальної апаратури при проведенні фізичного експерименту з дослідження процесу забруднення атмосферного повітря [32]

Schematic of Visualization setup

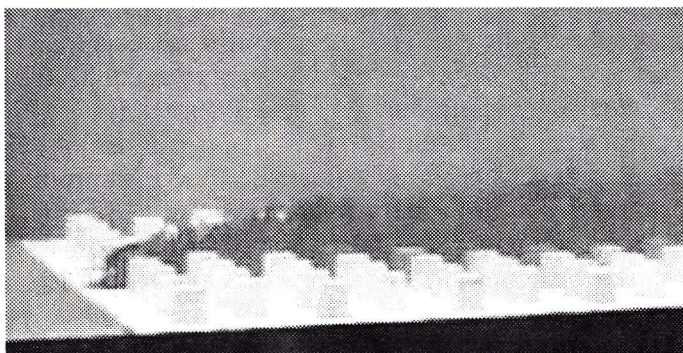


Рис. 1.8 — Модель міської забудови, у межах якої розсіюється забруднювач [32]

На сьогодні час можна виділити три варіанти проведення фізичного експерименту:

1. Фізичний експеримент, який проводиться з використанням апаратури, що забезпечує вимірювання параметрів без «проникнення» в потік (застосування лазера, оптичних методів і т.п. для вимірювання швидкості, концентрації). Такий підхід до отримання інформації «мінімізує» вплив побічних факторів (наприклад, ручної забір проб для аналізу і т.п.) на результати вимірювань. Проведення даних досліджень вимагає вкрай дорогого устаткування.

2. Фізичний експеримент, який проводиться з використанням апаратури, що дозволяє проводити вимірювання параметрів з «проникненням» в потік (наприклад, використання трубки Піто). Устаткування для вимірювання параметрів для таких експериментів значно дешевше, ніж для першого варіанту.

3. Фізичний експеримент, який проводиться тільки для візуалізації зон забруднення. Отримана інформація (аналіз кіно-, фотозйомки) дозволяє якісно визначати розміри, форму зон з підвищеною концентрацією.

Слід відзначити, що при використанні фізичного експерименту виникає низка проблем, наприклад:

— великі часові витрати на виготовлення моделі, установлення обладнання;

— необхідність використання дорогого обладнання для вимірювання необхідних параметрів у турбулентному потоці (системи *Laser Doppler*, *Ultra Sonic Turbulence Measurement* і т. д.) (рис. 1.4);

— значний час на проведення експерименту, оброблення даних;

— при проведенні фізичного експерименту в аеродинамічних трубах виникає проблема нееквівалентності експериментальних і реальних умов (недотримання критерію Рейнольдса).

**Натурне моделювання (натурні дослідження)** — це проведення експериментів прямо на полігоні, об'єкті (наприклад, замірювання концентрації домішки в приземному шарі повітря біля труб за різних метеорологічних умов тощо).

Натурний експеримент застосовується для дослідження різних процесів, наприклад, дослідження процесів атмосферної дифузії за різноманітних метеоумов, шляхом запуску трасерів в атмосфері на спеціальних полігонах (рис. 1.6), дослідження структури вітрового потоку біля будівель, витікання газів з резервуарів при аварійному

відкритті, визначення інтенсивності випаровування опарних речовин від зони розливу тощо.

Натурне дослідження також є дуже дорогим дослідженням і вимагає:

- спеціалізованої, унікальної апаратури (рис. 1.9);
- спеціальних експериментальних полігонів (рис. 1.10, 1.11);
- кваліфікованих фахівців;
- багато часу на проведення експерименту й оброблення даних.

Так, дослідження закономірностей поширення домішок в атмосфері за різноманітних метеоумов може тривати декілька місяців.

Дуже важливо відзначити, що існують прогнозні завдання, для яких не можна поставити фізичний експеримент на моделях або провести натурний експеримент. Наприклад, прогноз зон забруднення можливе при виверженні вулкана.

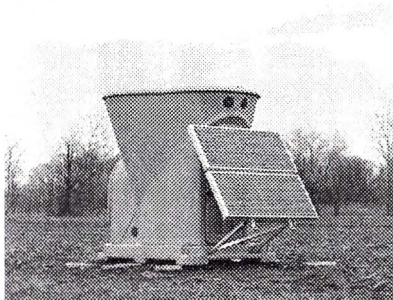


Рис. 1.9 — Устаткування SODAR для дослідження турбулентності атмосфери <http://sentrexwind.com/sodar>

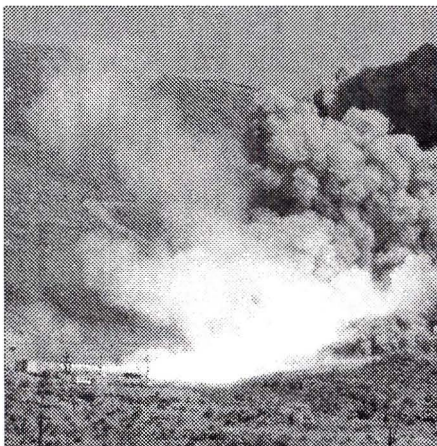


Рис. 1.10 — Полігон NASA для випробування ракетних двигунів <http://spynet.ru/blog/Interesting/39124.html>

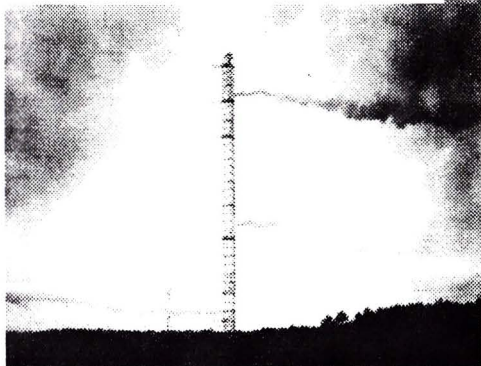


Рис. 1.11 — Полігон Brookhaven National Laboratory (дослідження з виявлення залежностей розсіювання шлейфу забруднювальної речовини в атмосфері) [38]

### 1.3 Види МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ

**Математичне моделювання** — дослідження явища, процесу на основі математичних моделей. Математична модель — це опис явища, процесу за допомогою засобів математики. На практиці, при використанні методу математичного моделювання, найбільш часто використовуються рівняння, які описують процес або об'єкт, що досліджується, а фізичні властивості процесу (об'єкта) відображаються за допомогою коефіцієнтів, які входять до цих рівнянь. Також слід зазначити, що математична модель не може врахувати всі фактори, які впливають на досліджуваний процес. Тому при розробленні математичних моделей ураховуються найбільш суттєві фактори, що впливають на процес, але оцінювання «ваги, вагомості» кожного фактора в майбутньої моделі вимагає кваліфікації користувача.

З погляду методології побудови моделей, надалі для розв'язання прогностичних задач у галузі охорони навколишнього середовища використовуються такі математичні моделі.

**Емпіричні моделі.** Ці моделі мають вигляд досить простих алгебраїчних співвідношень, з яких визначаються шукані величини, наприклад концентрація забруднення. Прикладом моделей даного класу є методика ОНД-86, яка використовується для прогнозування рівня забруднення атмосферного повітря в Україні. Емпіричні моделі створюються на основі оброблення даних експериментів.

Переваги емпіричних моделей:

- простота розрахунків (розрахункові залежності не містять інтегралів, спеціальних функцій тощо);
- не вимагають для застосування «особливих» знань у користувача (користувач не зобов'язаний глибоко знати закони гідродинаміки, гідрології тощо), і користувач може швидко навчитися працювати з ними;
- зручні для програмування з використанням стандартної комп'ютерної бази, але по суті не потребують використання комп'ютера для практичної реалізації;
- економічні (серійний розрахунок з використанням цих моделей доволі швидкий і дешевий).

### Недоліки емпіричних моделей:

- моделі не враховують низку факторів, що можуть серйозно впливати на процес. Наприклад, у більшості емпіричних моделей не враховується форма русла річки тощо;
- іноді втрачають фізичний зміст при деяких значеннях вхідних параметрів;
- моделі не в змозі дати просторове розподілення концентрації домішки в атмосфері;
- моделі сильно «прив'язані» до конкретних географічних умов, де проводився експеримент. Тому застосування їх у інших умовах втрачає зміст. Наприклад, якщо для моделі Гауса емпіричні коефіцієнти відповідають метеоумовам штату Невада, то застосування цих моделей на Україні вимагає обґрунтування.

Слід зазначити, що світові тенденції наукових розробок такі, що будь-якого роду емпіричні моделі починають поступатися місцем іншим, більш доказовим моделям. Наприклад, для завдань прогнозування забруднення атмосферного повітря при аваріях на хімічно небезпечних об'єктах, за кордоном, на сьогодні емпіричні моделі не використовуються через їх очевидну обмеженість обсягу та якості прогнозної інформації.

**Статистичні моделі** — прогнознi моделі, побудовані на базі оброблення результатів спостережень за допомогою статистичних методів. Для побудови цих моделей потрібна значна кількість даних вимірювань, що потребує багатого часу на одержання цих даних та їх оброблення. Ці моделі, як і емпіричні, мають вигляд простих алгебраїчних співвідношень, наприклад такого типу

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n ,$$

де  $y$  — шукана величина (наприклад, концентрація CO);

$a_0$  — константа регресії;

$a_1 \dots a_n$  — параметри регресії;

$x$  — відомі параметри (predictors).

Моделі даного класу не мають «фізичного» підґрунтя. За кордоном ці моделі використовуються в місцевих адміністраціях для планування дій зі зниження забруднення атмосферного повітря. Слід відзначити, що моделі, як правило, використовуються для



прогнозів на період у декілька годин, діб. Для розв'язання задач у випадку аварій ці моделі надалі за кордоном не використовуються через низьку якість прогнозованої інформації. Загалом моделі цього класу мають теж переваги та недоліки, як і емпіричні моделі.

**Камерні моделі (Box models).** Дані моделі засновано на застосуванні рівняння балансу маси при розрахунку концентрації для обраного контрольного об'єму (камери), що охоплює деяку область, у якій здійснюється прогноз якості повітряного середовища (наприклад, блок моделі ADAM — «Air Force Dispersion Assessment Model», розрахунковий крок за часом до цієї моделі становить 1 добу). Для розрахунку розсіювання забруднювача з урахуванням рельєфу місцевості моделі не застосовуються. Вони прості для використання і це їхня перевага. Але моделі не можуть дати диференціації концентрації домішки за висотою та розв'язання іншими напрямками з плином часу, що особливо важливо при розгляді завдань, пов'язаних з аварійним забрудненням атмосфери. Це — їхній недолік.

**Аналітичні моделі** — це точне рішення математичної задачі, виражене через деяку послідовність функцій чи елементарних математичних операцій. Аналітичний розв'язок одержуємо за допомогою використання математичних операцій (інтегрування, перетворення Лапласу, Фур'є тощо) для розв'язання рівняння, що моделює процес дослідження. Часто аналітичні моделі мають вигляд конкретної формули, з якої визначається невідома величина, наприклад, концентрація домішки. Перевагою аналітичних моделей є те, що вони представляють точний розв'язок математичної задачі, тому можуть використовуватися для верифікації (перевірки) більш складних математичних моделей або, у ряді випадків, для розв'язання задач ідентифікації параметрів математичної моделі (наприклад, для визначення коефіцієнта дифузії на базі одержаних даних фізичного експерименту).

Але аналітичний розв'язок можна одержати лише для спрощених, дуже ідеалізованих фізичних процесів, що є недоліком цих моделей. Тому одержаний аналітичний розв'язок часто малопридатний для практики, з погляду сучасних вимог, щодо можливостей математичної моделі (наприклад, при дослідженні процесу перенесення домішки в атмосфері на базі аналітичних моделей

не враховується поле швидкості вітру, яке змінюється за наявності будівель та складного рельєфу місцевості). *Недоліком* аналітичних моделей є також те, що до розрахункової формули можуть входити спеціальні функції, кратні інтеграли, що викликає певні труднощі при розрахунку.

Аналітичні моделі можна використовувати для пілотних розрахунків на початковому етапі розв'язання складної практичної задачі.

**Screening Models.** Під цим терміном за кордоном розуміються вище перераховані математичні моделі. Screening models призначені для первинного, «грубого» оцінювання рівня забруднення атмосфери й використовуються на перших етапах прогнозу, коли ще немає сенсу застосовувати більш точні моделі. Наприклад, якщо початкові дані для моделювання відомі дуже наближено. У прикладних програмах (кодах) нерідко *screening models* — це модель Гаусса — один із видів аналітичної моделі (наприклад, коди TSCREEN, VALLEY, RTDM3.2, VISCREEN-).

**Чисельні моделі** одержують шляхом застосування чисельних методів (наприклад, методу кінцевих різниць, методу граничних елементів тощо) для розв'язання диференціальних чи інтегральних рівнянь, що складають основу математичної моделі. Ці моделі на сьогодні дуже інтенсивно розвиваються й застосовуються для розв'язання складних прогнозних задач, особливо для задач поширення забруднювальних речовин у навколишньому середовищі. До кола цих моделей входять такі.

**Лагранжеві моделі.** У Лагранжевих моделях еволюція частинки забрудненого повітря вивчається вздовж траєкторії руху, починаючи від конкретної початкової точки. Найпростішою Лагранжевою моделлю є модель Гауса для клубка, що рухається вздовж траєкторії перенесення.

В Україні моделі даного класу не набули свого поширення. За кордоном, як правило, дані моделі використовуються для розрахунку далекого перенесення забруднювальних речовин в атмосфері. Лагранжеві моделі створюють основу для низки комерційних пакетів програм, наприклад "ARCO", "MOE", GRAL, "NAME", "NARAC/ADAPT-LODI", "QWIC" тощо). Модель "NAME" використовується для розрахунку «ближнього» переносу домішки.

Кінематичні чисельні моделі — це підгрупа чисельних моделей, які базуються на чисельному розв'язанні рівняння масоперенесення домішки (2D, 3D варіанти). Моделі даної підгрупи дозволяють оперативно розраховувати процес забруднення атмосферного повітря з урахуванням основних фізичних факторів, що впливають на перенесення домішки в атмосфері, однак прогнозування здійснюється на базі заданого поля швидкості вітру.

CFD (Computational Fluid Dynamics) моделі — це моделі, які базуються на чисельному розв'язанні задачі аерогідродинаміки (це перший крок моделювання для визначення поля швидкості вітру або водного потоку) та подальшому розв'язанні задачі масоперенесення (це другий крок моделювання). Для задач, пов'язаних із прогнозуванням забруднення атмосфери моделі даного класу, як запропонував проф. С. Мураками, називають CWE (Computational Wind Engineering) моделі.

Чисельні моделі дають можливість відтворювати процес забруднення навколишнього середовища практично з тією ж близькістю, що і фізичний експеримент та добре візуалізувати результати моделювання (рис. 1.12).

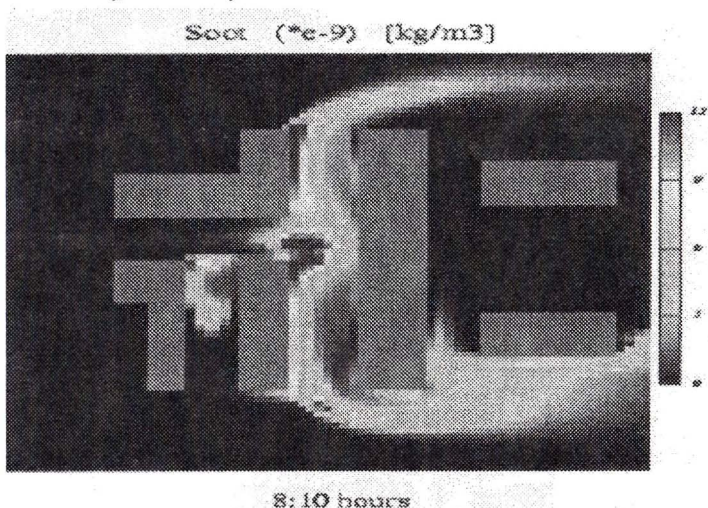


Рис. 1.12 — Розрахунок зони забруднення, що формується між будівлями (CFD модель [37])

У зарубіжній літературі чисельні моделі, розроблені під конкретний об'єкт, називають «field models». Моделі цього класу використовуються для розв'язання різних прикладних завдань (прогнозування рівня забруднення атмосферного повітря в містах, на проммайданчиках тощо), а особливо при прогнозуванні наслідків аварійних ситуацій.

**Комплексні моделі** — це синтез аналітичних і чисельних моделей.

Використання чисельних моделей для розв'язання прогнозних задач дістало назву «чисельне моделювання», «обчислювальний експеримент». Проведення чисельного моделювання включає низку етапів:

1. Створення «фізичної» моделі об'єкта (процесу). Під терміном «фізична модель» розуміємо, за А. Самарським, ті фізичні закони, які описують процес (об'єкт), що моделюється. На цьому етапі записуються диференціальні рівняння та крайові умови, що представляють математичний опис процесу, що моделюють.

2. Розроблення чисельного алгоритму для розв'язання диференціальної задачі, яка поставлена на першому етапі.

3. Розроблення програми (коду) для персонального комп'ютера, яка реалізує розрахунок на базі побудованого чисельного алгоритму. У зарубіжній науковій літературі такий «підсумковий» код називають «*generic model*».

4. Тестування створеної «*generic model*». Тестування здійснюється в двох напрямках:

— «*verification*» — це перевірка моделі шляхом порівняння одержаних з її допомогою результатів з результатами інших авторів, з аналітичним розв'язком задачі або з даними, одержаними на основі іншого методу розрахунку;

— «*validation*» — порівняння одержаних даних із даними експерименту. Слід відзначити, що далеко не завжди існують експериментальні дані для перевірки реальних прикладних задач.

5. Проведення розрахунків на базі створеної *generic model* та аналіз результатів чисельного моделювання.

**Перевагою** чисельних моделей є можливість адекватно моделювати різноманітні фізичні процеси з високою точністю наближення. Крім цього, чисельне моделювання дозволяє досліджувати

такі явища, для яких неможливо поставити фізичний експеримент (наприклад, неможливо провести фізичний експеримент, щоб спрогнозувати наслідки ядерної війни). Недоліком чисельного моделювання є те, що в деяких випадках розрахунків на базі чисельних моделей може тривати декілька тижнів. Крім цього, побудова чисельних моделей потребує високої кваліфікації розробника.

Комерційні коди. На практиці, у деяких випадках використовують комерційні пакети програм (коди), які реалізують різноманітні чисельні моделі. Наприклад, при прогнозуванні якості атмосферного повітря використовують такі коди: *CMAQ, WRF, SILAM, MUSKAT, LOTUS-EUROS, MACMOD, WRF-MUSKAT, DREAM, TCAM'* та інші; при розв'язанні задач аерогідродинаміки — коди *ANSYS, FLUENT* тощо.

Слід відзначити, що комерційні коди поділяються на групи:

1. Коди, які розроблені для конкретного замовника й використовуються тільки на об'єктах цього замовника. Це, наприклад, коди, розроблені для проведення аеродинамічних розрахунків у фірмі «Boeing». Доступ інших користувачів до цих кодів — неможливий.

2. Ліцензійні коди, які купують різні організації для проведення досліджень. Наприклад, усічена версія коду «ANSYS» для проведення теплових розрахунків у рухомих установках, придбана КБ «Південне», м. Дніпропетровськ (ціна версії — 300000\$).

3. Комерційні коди, які знаходяться у вільному доступі або за умовну плату — Інтернет, приватний продавець і т.п. (тут поняття «ліцензія» — відсутнє).

Слід підкреслити, що використання неліцензійних комерційних кодів у науковій діяльності може призвести до відповідальності за порушення авторських прав.

Відомо, що постійно відбувається «удосконалення» комерційних кодів і, з певною регулярністю, з'являються їхні нові версії. Наприклад, код *MM5*, доволі широко використовуваний нещодавно (і ще використовується частково в даний час), поступається місцем іншому коду — *WRF* тощо. Самостійне налаштування чужого коду на розв'язання іншого класу задач, навіть «наближеного», користувач здійснити не може. Іншими словами, користувач комерційного коду буде розв'язувати тільки ті задачі та з тим ступенем ідеалізації процесу, що моделюється, які «дозволив» розробник цього коду.

## 1.4 МОДЕЛЬ МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ ДОМІШКИ В ПОВІТРЯНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Розглянемо висновок рівняння масоперенесення, яке є базовим при моделюванні процесів забруднення навколишнього середовища. Це рівняння використовується для моделювання процесів забруднення навколишнього середовища хімічно небезпечними, радіоактивними та біологічними домішками. Висновок цього рівняння проведемо для повітряного потоку.

Розглянемо простір, повністю заповнений повітрям. Виділимо в потоці контрольний об'єм у вигляді паралелепіпеда зі сторонами  $dx$   $dy$   $dz$  (рис. 1.13).

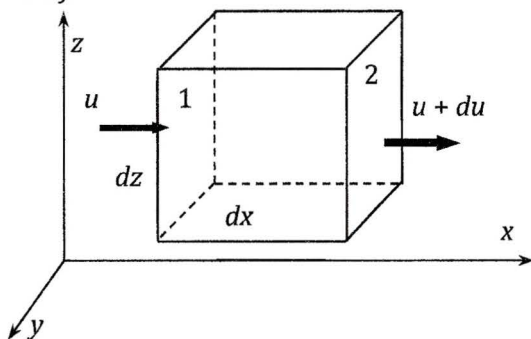


Рис. 1.13 — Контрольний об'єм для запису рівняння перенесення домішки

Нехай на грані 1 швидкість потоку рідини дорівнює  $u$  і концентрація домішки в одиниці об'єму —  $\varphi$ . Це кількість забруднення (маса) в одиниці об'єму повітря. Тоді на грані 2, розташованій на відстані  $dx$  від грані 1, ці параметри будуть дорівнювати:

$$u + du = \left( u + \frac{\partial u}{\partial x} \right) dx,$$

$$\varphi + d\varphi = \left( \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx.$$

Будемо вважати, що пасивна (не впливає на гідродинаміку течії) домішка переміщується разом із повітрям.

За час  $dt$  через грань 1 із потоком у середину контрольного об'єму ввійде маса домішки

$$\varphi u dy dz dt .$$

За цей же час через грань 2 з контрольного об'єму вийде маса домішки

$$\left( \varphi u + \frac{\partial \varphi u}{\partial x} dx \right) dy dz dt .$$

Будемо вважати, що перенесення домішки через грані контрольного об'єму здійснюється не тільки за рахунок конвекції, але й турбулентної дифузії. Тоді за рахунок турбулентної дифузії через грань 1 за час  $dt$  буде перенесена маса домішки

$$q|_1 = -\mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} dz dy dt ,$$

а через грань 2

$$q_2 = q|_1 + \frac{\partial q}{\partial x} dx = \left( -\mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx \right) dz dy dt ,$$

де  $\mu_x$  — значення коефіцієнта турбулентної дифузії (далі — дифузії) у напрямку  $x$ .

Зміна маси домішки в контрольному об'ємі за рахунок процесів конвекції й дифузії в напрямку осі  $ox$  буде дорівнювати:

$$\begin{aligned} & \left( u\varphi + \frac{\partial u\varphi}{\partial x} dx + q + \frac{\partial q}{\partial x} dx \right) dy dz dt - (u\varphi + q) dy dz dt = \\ & = \left( \frac{\partial u\varphi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right) dx dz dy dt . \end{aligned} \quad (1.1)$$

При виведенні виразу (1.1) відкинуто складові другого порядку малості. Аналогічно, зміна кількості маси домішки в контрольному об'ємі за рахунок процесів конвекції й дифузії в напрямку осей  $oy$  і  $oz$  складатиме:

$$\left( \frac{\partial v \varphi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \right) dx dz dy dt,$$

$$\left( \frac{\partial w \varphi}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) \right) dx dz dy dt.$$

де  $v, w$  — компоненти вектора швидкості потоку в напрямку осей  $oy$  і  $oz$ .

Накопичення домішки в контрольному об'ємі  $dx dy dz$  за час  $dt$  буде дорівнювати:

$$\frac{\partial(\varphi)}{\partial t} dt dx dy dz.$$

Це накопичення викликане втіканням домішки через границі контрольного об'єму за час  $dt$ , що дозволяє скласти рівняння балансу маси домішки в контрольному об'ємі:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \frac{\partial w \varphi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right). \quad (1.2)$$

Це рівняння є одним із базових при розв'язанні задач міграції забруднення в атмосфері.

У рівнянні (1.2) для більш повного опису процесу міграції домішки розрізняють коефіцієнти дифузії за різними напрямками. Однак при практичному його використанні для розв'язання конкретних задач значні труднощі виникають у визначенні залежностей  $\mu = f(x, y, z)$ . Експериментальне визначення параметра дифузії  $\mu$  в натурних умовах вимагає великих часових і матеріальних витрат.

При дослідженні процесів міграції часто необхідно враховувати процеси хімічного розпаду домішки, вимивання опадами. У цьому випадку рівняння міграції має вигляд [33]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \frac{\partial w \varphi}{\partial z} + \sigma \varphi = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right), \quad (1.3)$$

де  $\sigma$  — коефіцієнт, що враховує хімічний розпад або вимивання опадами.



На практиці джерела забруднення дуже різноманітні, однак універсальним способом математичного опису буде представлення їх через дельта-функції Дірака. Це подання викидів у вигляді системи точкових джерел, що можуть бути постійно діючими (стаціонарними), миттєвими та іншими.

Надалі джерела забруднення інтенсивності  $Q_i$ , розташовані в потоці, будемо описувати за допомогою дельта-функції Дірака. У цьому випадку рівняння міграції забруднювача матиме вигляд:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \frac{\partial w \varphi}{\partial z} + \sigma \varphi = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \sum Q_i \delta(x-x_i) \delta(y-y_i) \delta(z-z_i) + \\ & \quad + \sum G_j \delta(x-x_j) \delta(y-y_j) \delta(z-z_j) \delta(t-t_j), \end{aligned} \quad (1.4)$$

де  $x_i, y_i, z_i$  — координати розташування точкового джерела забруднення;

$Q_i$  — інтенсивність стаціонарного точкового викиду, [кг/с];

$G_j$  — інтенсивність точкового викиду протягом часу, [кг/с];

$\delta(x-x_j), \delta(y-y_j), \delta(z-z_j), \delta(t-t_j)$  — позначення дельта-функції Дірака, де підкреслюється особлива точка в заданні цієї функції.

## 1.5 МОДЕЛЮВАННЯ ТРИВИМІРНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ ДОМШКИ В АТМОСФЕРІ

Розглянуті вище фізичні механізми перенесення й викиду забруднювальних речовин описуються диференціальним рівнянням [33]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \frac{\partial (w-w_s) \varphi}{\partial z} + \sigma \varphi = \\ & = \operatorname{div}(\mu \nabla \varphi) + \sum_{i=1}^N q_i(t) \delta(r-r_i(t)), \end{aligned} \quad (1.5)$$

де  $\varphi$  — концентрація забруднювальної речовини в одиниці об'єму повітря;

$u, v, w$  — компоненти вектора швидкості повітряного середовища в декартовій системі координат  $X, Y, Z$ , площина  $XOY$  відповідає поверхні Землі;

$w_s$  — швидкість гравітаційного осідання зважених частинок забруднювальної речовини;

$\sigma$  — коефіцієнт хімічного розпаду забруднення;

$\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$  — коефіцієнти турбулентної дифузії;

$q_i$  — інтенсивність точкових джерел забруднення;

$r_i = (x_i, y_i, z_i)$  — місце розташування точкових джерел забруднення;

$\delta(r - r_i)$  — дельта-функція Дірака;

$t$  — час.

Диференційне рівняння (1.5) без джерел викидів, у випадку сталої в просторових координатах концентрації  $\varphi = \text{const}$  і відсутності хімічного розпаду  $\sigma = 0$ , повинне мати вираз  $\varphi = \text{const}$ , тобто повинне забезпечуватися збереження маси домішки при довільному конвективному перенесенні. Звідси випливає умова соленоїдальності:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (1.6)$$

Диференціальне рівняння (1.5) описує розсіювання забруднювальної речовини в просторовій області  $R$ , обмеженій земною поверхнею  $z = f_0(x, y)$  і верхньою межею можливого вертикального поширення забруднення  $z = H$ , яку можна подати у вигляді обмежувальної площини, де вертикальна швидкість повітряного потоку  $w|_{z=H} = 0$ .

Територія, форма області на земній площині, з якою пов'язується задача розсіювання забруднення, вибирається прямокутною  $\{0 \leq x \leq X, 0 \leq y \leq Y\}$ . На першому етапі математичного моделювання просторового перенесення забруднювальних речовин можна не враховувати рельєф місцевості чи враховувати його побічно, задаючи швидкості руху повітряного потоку відповідно реальні, тобто характерні для досліджуваної території та її рельєфу, однак компоненти швидкості обов'язково повинні задовольняти рівняння нерозривності (1.6).

Отже, рішення рівняння (1.5) будемо будувати в області  $R$ , що має форму паралелепіпеда:  $R = \{0 \leq x \leq X, 0 \leq y \leq Y, 0 \leq z \leq Z\}$ .

Розглянемо постановку початкових і граничних умов для рівняння (1.5).

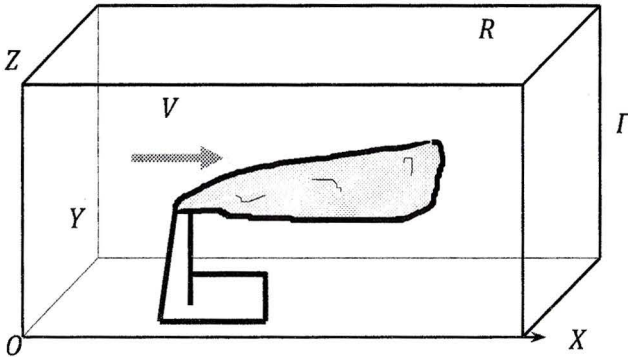


Рис. 1.14 — Схема розрахункової області

На бічних сторонах паралелепіпеда  $R$  для моментів часу  $t > 0$  ставляться такі граничні умови. На частині границі  $\Gamma$ , де повітряні маси втікають у розрахункову область, вважаємо, що концентрація забруднення  $\phi$  відома. Найчастіше не враховується забруднення, внесене ззовні в розрахункову область  $R$ , тому вважаємо

$$\phi|_{\Gamma^-} = 0, \text{ на частині границі } \Gamma, \text{ де } (\vec{V} \cdot \vec{n}) < 0. \quad (1.7)$$

Цю частину бічної розрахункової області  $R$  позначимо  $\Gamma^-$ .

У тому випадку, якщо повітряні маси на границі впливають з розрахункової області  $R$ , нехтуємо дифузійним перенесенням у порівнянні з конвективним перенесенням забруднення з масами повітря, що рухаються, тобто

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0, \text{ на частині границі } \Gamma, \text{ де } (\vec{V} \cdot \vec{n}) \geq 0. \quad (1.8)$$

Цю частину бічної границі розрахункової області позначимо  $\Gamma^+$ . Тут,  $\vec{n}$  – одиничний вектор зовнішньої нормалі до границі  $\Gamma$ ,  $\vec{V}$  – вектор швидкості плинку повітря.

На площині  $z = 0$  (поверхня землі) ставиться умова [33]

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0} = \alpha \varphi, \quad \alpha > 0, \quad (1.9)$$

де  $\alpha$  — коефіцієнт, що враховує характер взаємодії забруднювальної речовини з підстеляючою поверхнею землі.

На верхній границі можливого поширення забруднення  $z = Z$  вертикальна складова швидкості повітря  $w = 0$ , і тому може бути поставлена умова відсутності дифузійного перенесення на границі  $z = Z$ :

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=Z} = 0 \text{ чи умова } \varphi|_{z=Z} = 0,$$

яку варто використовувати для зважених забруднювальних речовин.

Якщо виконується розрахунок поширення забруднення, внесеного ззовні в розрахункову область з деякою кількістю забруднювальної речовини з концентрацією  $\varphi_s$  разом із хмарою, то граничну умову (1.7) для рівняння (1.5) слід переписати як:

$$\varphi|_{r^-} = \varphi_s, \text{ якщо } (\vec{V} \cdot \vec{n}) < 0. \quad (1.10)$$

Початкову умову для рівняння (1.5) поставимо у вигляді:

$$\varphi = 0 \text{ при } t = 0$$

або

$$\varphi = \varphi_0(x, y, z) \text{ при } t = 0,$$

для задач вивчення розсіювання початкового викиду у формі деякої хмари забруднення.

У розглянутій моделі джерела забруднення — заводські труби, підприємства, транспорт тощо — моделюються точковими джерелами заданої інтенсивності  $q_i$  й відомого місця розташування. Інтенсивність джерел викиду  $q_i$  може варіюватися з часом  $t$ , наприклад, зміна інтенсивності викиду в атмосферу від теплових електростанцій у різні періоди року — літо, зима; зміна інтенсивності викиду підприємств у різні робочі зміни — денна, нічна.

При побудові математичної моделі варто виділяти постійно діючі в часі джерела викиду, що характеризуються викидом у повітряне середовище забруднювальних речовин протягом досить великого проміжку часу. Це, наприклад, поширення забруднення від промислових підприємств, викид спор рослин (даний процес може тривати 1–1,5 міс.), викид продуктів згоряння при лісових пожежах тощо. Крім постійно діючих джерел забруднення, модель повинна дозволити описати поширення забруднюючих речовин від циклічно діючих джерел, що рухаються.

Схематично дію стаціонарних і циклічних джерел показано на рис. 1.15.

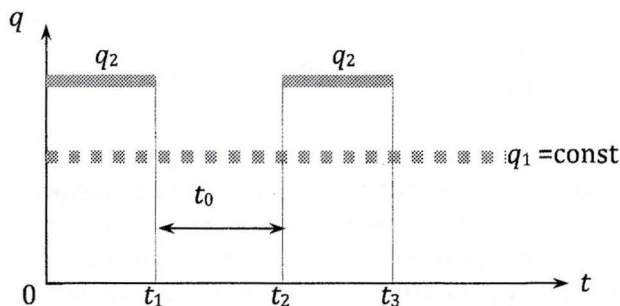


Рис. 1.15 — Можливі залежності інтенсивності викиду джерел забруднення від часу:  $q_1$  — постійно діюче джерело викиду домішки;  $q_2$  — циклічно діюче джерело викиду домішки;  $t_0$  — час між циклами роботи джерела викиду

Інформація про кількісний (інтенсивність джерел викиду —  $qi$ ) і якісний склад забруднення, що викидається (пил, сажа тощо) встановлюється для кожного конкретного джерела на основі відомих досліджених чи розрахункових даних. Так, для підприємств різного профілю дані про викиди в атмосферу забруднювальних речовин встановлюються на основі інвентаризації джерел викиду, і тому дана інформація, необхідна для реалізації моделі, відома.

При залпових викидах забруднювача й утворенні його хмари доцільно сформулювати початкові умови, що описують розмір початкової хмари та концентрацію забруднення в ній. Такий сценарій події здійснюється у випадку аварій на підприємствах різного профілю, транспорті та пов'язаний з викидом у повітряне середовище забруднювальних і отруйних речовин за малий проміжок часу.

У випадку моделювання аварійних ситуацій (наприклад, при розробленні плану ліквідації аварійної ситуації на хімічно небезпечному об'єкті), пов'язаних із залповими викидами забруднювальних речовин в атмосферу при аваріях на газосховищах, транспорті тощо, за інтенсивність викиду  $q$  звичайно приймають його найбільше значення, наприклад, весь запас забруднювача, що зберігається з метою прогнозування найгіршого варіанта забруднення атмосфери, поверхні, що підстеляє виявлення зон значної концентрації забруднювача і прогнозування часу досягнення хмарою забруднення житлових районів та загрози життєдіяльності людей (тварин, рослин, якщо мова йде про сільськогосподарські об'єкти).

У випадку аварійного викиду токсичної речовини за початкову умову можна прийняти хмару забруднювача над місцем аварії. Об'єм цієї хмари можна приблизно розрахувати так:

$$V = \frac{22,4 \cdot \theta \cdot G}{\mu \cdot \varphi_{\text{стх}}},$$

де  $\theta$  — коефіцієнт ( $\theta = 0,5$  для зріджених під тиском газів;  $\theta = 1$  для газів під атмосферним тиском);

$G$  — маса речовини;

$\mu$  — молекулярна вага речовини;

$\varphi_{\text{стх}}$  — об'ємна концентрація речовини (наприклад:  $\varphi_{\text{стх}} = 4,03$  об. % для пропану;  $\varphi_{\text{стх}} = 5,66$  об. % для етану;  $\varphi_{\text{стх}} = 4,99$  об. % для ацетану).

Коефіцієнт  $\sigma$  ураховує зміну концентрації забруднення внаслідок дії з часом різних факторів:

- хімічні перетворення забруднювальних речовин (окислювання, нейтралізація тощо) у випадку їхніх реакцій із зовнішнім середовищем  $\sigma_1$ ;

- вимивання часток забруднювальної речовини опадами  $\sigma_2$ .

Значення коефіцієнта  $\sigma_2$  визначається концентрацією та площею поверхні водяних крапель, фізико-хімічними властивостями забруднювальної речовини, наявністю в повітрі інших домішок, значенням рН дощової води. Необхідно відзначити, що процес вимивання може проходити як у хмарі, так і під хмарою.

Відомі емпіричні залежності для розрахунку коефіцієнта  $\sigma_2$  [15], наприклад:  $\sigma_2 = K_r K_0 I$ , де  $K_r = 10^{-5}$  год/мм/с;  $I$  — інтенсивність

*Навчальне видання*

БІЛЯЄВ Микола Миколайович  
БІЛЯЄВА Вікторія Віталіївна  
КІРІЧЕНКО Павло Сергійович

## **Моделювання і прогнозування стану довкілля**

Підручник для студентів вищих навчальних закладів

Формат 60×84/16. Ум. др. арк. 12,13. Обл.-вид. арк. 8,34.  
Тираж 300 пр.

Видавець Р. А. Козлов  
вул. Рокоссовського, 5/3, м. Кривий Ріг, 50027  
(0564) 92-20-77 097-192-20-77  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4514 від 01.04.2013 р.

Друкарня С. Г. Щербенка  
вул. Рокоссовського, 5/3, м. Кривий Ріг, 50027  
(0564) 92-20-77 097-192-20-77  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4561 від 13.06.2013 р.