МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Л.М. Полетаєва, С.М. Юрасов, В.Г. Ільїна

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ

конспект лекцій

ОДЕСА - 2005

УДК 504
ББК 28.081
П-49

Друкується за рішенням Вченої ради Одеського державного екологічного університету (*протокол №* 11 *від* 30.12.2004 *р.*).

Л.М. Полетаєва, С.М. Юрасов, В.Г. Ільїна
Моделювання та прогнозування стану довкілля: Конспект лекцій. – Одеса: Дніпропетровськ: «Економіка», 2005. – 179 с.

Конспект лекцій присвячений проблемі застосування методів математичного моделювання стану та прогнозу забруднення атмосферного повітря, природних вод та грунтово-рослинного покриву.

Конспект лекцій розраховано на студентів очної та заочної форми навчання спеціальності “Екологія та охорона навколишнього середовища” при вивченні дисципліни “Моделювання та прогнозування стану довкілля”.

© Одеський державний
екологічний університет, 2005

З М І С Т

ВСТУП..... 6

1 ЗАГАЛЬНІ УЯВЛЕННЯ ПРО МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ВИДИ ПРОГНОЗІВ ЗАБРУДНЕННЯ АТМОСФЕРИ..... 7

1.1 Постановка загальної задачі розрахунку поширення атмосферних домішок..... 7
1.2 Рівняння балансу для будь-якої субстанції..... 9
1.3 Рівняння балансу атмосферних домішок..... ...12
1.4 Початкові і граничні умови..... ...15
1.5 Вплив орографії на поширення домішки від джерела..... ...17
1.6 Поширення пасивних атмосферних домішок від миттєвих джерел при постійному коефіцієнті турбулентності..... ...19
1.7 Рівняння балансу атмосферних домішок при стаціонарних процесах при постійному напрямку вітру..... ...21
1.8 Рішення рівняння балансу атмосферних домішок при стаціонарних процесах для приграничного шару атмосфери..... ...24
1.9 Чисельне моделювання процесів забруднення атмосфери великих міст і їхнього впливу на термічний режим атмосфери…..... ...26
1.10 Фізичні основи прогнозування забруднення повітря..... ...31
1.11 Чисельний прогноз концентрації шкідливої домішки по дифузійній моделі..... ...34
1.12 Прогноз концентрації шкідливої домішки по гаусовій моделі..... ...37
1.13 Узагальнені показники забруднення повітря по місту в Цілому 40
1.14 Вплив мікрометеорологічних умов у місті на формування рівня забруднення атмосфери..... ...42
1.15 Вплив синоптичних умов на забруднення атмосфери..... ...44
1.16 Прогноз метеорологічних умов забруднення атмосфери..... ...45
1.17 Прогнозування забруднення повітря методом лінійного регресійного аналізу..... ...49
1.18 Методи нелінійності регресії. Прогнозування забруднення повітря методом розпізнавання образів (МРО)..... ...52
1.19 Метод послідовної графічної регресії (МПГР)..... ...55
1.20 Оцінка ефективності методів прогнозу забруднення повітря..... ...59
1.21 Організація робіт по прогнозуванню забруднення повітря Складання попереджень.....61

2 МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ВОДНОГО СЕРЕДОВИЩА.....65

2.1 Поняття математичної моделі і математичного моделювання..... ...65
2.2 Точність експериментів..... ...66
2.2.1 Наближені числа..... ...66
2.2.2 Абсолютна та відносна похибки, гранична похибка.....66
2.2.3 Правила оцінки похибок при обчисленні.....67
2.3 Статистичне моделювання стану водного середовища.....68
2.3.1 Підбір емпіричних формул.....68
2.3.2 Підбір параметрів рівняння регресії.....71
2.3.3 Режимні функції висоти хвиль..... ...74
2.4 Моделювання розповсюдження забруднювальних речовин у водному середовищі..... ..78
2.4.1 Процеси розповсюдження речовини у водному середовищі..... ..78
2.4.2 Моделювання розповсюдження речовини у турбулентному потоці.....79
2.4.3 Моделювання розповсюдження забруднювальних речовин при аварійних розливах (нестановлена дифузія).....89
2.5 Імітаційне моделювання (метод Монте-Карло)..... ..98
2.5.1 Сутність методу, випадкові числа з рівномірним розподіленням..... ..98
2.5.2 Одержання випадкових чисел.....100
2.5.3 Перетворення випадкових величин.....101
2.5.4 Приклад використання методу Монте-Карло: розрахунок системи масового обслуговування.....102

3 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЮВАЛЬНИХ РЕЧОВИН У ГРУНТОВОМУ ТА РОСЛИННОМУ СЕРЕДОВИЩІ..... .108

3.1 Моделювання основних процесів життєдіяльності рослин..... .108
3.2 Моделювання міграції радіонуклідів в агроценозах.....112
3.2.1 Системний підхід у вивченні процесів міграції радіонуклідів в агроценозах.....112
3.2.2 Моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у профілі ґрунту.....115
3.2.3 Моделі міграції радіонуклідів у системі "ґрунт – рослина"..... .121
3.2.4 Моделювання міграції радіонуклідів у посадках верби корзинової (*Salix viminalis L.*) при фітореабілітації забруднених земель зони ЧАЕС..... .126
3.2.5 Моделювання міграції радіонуклідів по харчових

ланцюжках..... 137
3.2.6 Моделювання транспорту радіонуклідів в агросфері..... .141
3.2.7 Оцінка доз опромінення населення за рахунок водних шляхів міграції радіонуклідів (моделі, реконструкція доз опромінення і прогнози)..... .143
3.3 Математичне моделювання процесу поглинення важких металів грунтом та рослинами..... .160
3.3.1 Основні характеристики грунту, які обумовлюють поглинання важких металів..... .160
3.3.2 Морфологічні характеристики рослин, які обумовлюють швидкість поглинання важких металів.....162
3.3.3 Розрахунок швидкості поглинання та міграції важких металів у грунті і рослинах.....163
3.3.4 Розрахунок коефіцієнту токсичності важких металів для рослин..... .164
3.4 Математичне моделювання впливу осолонцювання та засолення грунту на розвиток рослин..... .164
3.4.1 Моделювання впливу осолонцювання грунту на ріст і розвиток та на їх екологічну чистоту.....164
3.4.2 Моделювання впливу засолення грунту на ріст і розвиток та на їх екологічну чистоту.....166
3.5 Визначення виносу біогенних елементів з сільськогосподарських угідь..... .167
3.5.1 Класифікація та характеристики біогенних елементів.....167
3.5.2 Види мінеральних добрив, які містять біогенні елементи....168
3.5.3 Розрахунок виносу біогенних елементів з сільськогосподарських угідь.....169

ЛІТЕРАТУРА….....175

УМОВНІ СКОРОЧЕННЯ..... .177

ВСТУП

Відомо, що взаємодію різноманітних факторів, що визначають структуру і особливості функціонування природних систем та розповсюдження у них забруднювачів, можливо врахувати за допомогою методів математичного та імітаційного моделювання. Ці методи можуть не тільки відповісти на запитання про сучасний стан довкілля, але і допомогти у прогнозуванні майбутнього його стану.

“Моделювання та прогнозування стану довкілля” є дисципліною професійної та практичної підготовки бакалаврів.

Метою вивчення курсу “Моделювання та прогнозування стану довкілля” є формування у студентів теоретичних знань та практичних навичок у галузі математичного моделювання реальних процесів розповсюдження шкідливих домішок у довкіллі, складання прогнозів забруднення довкілля та застосування їх для регулювання техногенних викидів підприємств до навколишнього середовища.

Головне місто приділяється у конспекті лекцій “Моделювання та прогнозування стану довкілля” приділяється термінам і поняттям, що застосовуються в межах означеного курсу; основним принципам, підходам та методам оцінки та прогнозу стану довкілля; головним факторам середовища, що впливають на забруднення довкілля; основним математичним моделям розрахунку розповсюдження шкідливих домішок; типам прогнозів забруднення повітря, ґрунтів та поверхневих вод.

Більш докладно висвітлені: чисельні та статистичні моделі розрахунку розповсюдження шкідливих домішок; узагальненні показники забруднення середовища; фактори та умови, які формують концентрацію забруднюючої домішки у геофізичному середовищі; існуючі прогнози забруднення повітря, ґрунтового покриву, рослинного середовища, поверхневих вод з врахуванням регіональних особливостей окремих міст та підприємств; недоліки існуючих моделей і схем прогнозу та шляхи їх удосконалення і розвитку.

Зміст конспекту лекцій відповідає робочим та типовим програмам дисципліни “Моделювання та прогнозування стану довкілля”.

Конспект лекцій розраховано на студентів очної та заочної форми навчання спеціальності “Екологія та охорона навколишнього середовища” при вивченні дисципліни “Моделювання та прогнозування стану довкілля”.

1 ЗАГАЛЬНІ УЯВЛЕННЯ ПРО МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ВИДИ ПРОГНОЗІВ ЗАБРУДНЕННЯ АТМОСФЕРИ

1.1 Постановка загальної задачі розрахунку поширення атмосферних домішок

Однією з основних проблем, що виникли в зв'язку з негативними наслідками науково-технічного прогресу, є охорона навколишнього середовища (ОНС) від забруднення його різними по своїй природі хімічними речовинами, контроль і регулювання ступеня впливу виробництва на його санітарний стан.

При вивченні різних фізичних явищ застосовуються два методи досліджень, що дозволяють одержати кількісні закономірності для аналізу явищ. У першому випадку йдуть по шляху узагальнення **емпірично** встановлених закономірностей; у другому виходять зі строгого **теоретичного** розгляду проблеми. Чисто теоретичні, як і чисто емпіричні методи, зустрічаються вкрай рідко внаслідок того, що на практиці необхідно витягти максимальну кількість інформації як емпіричної, так і теоретичної.

При експериментальному методі дослідження кожне конкретне явище повинне бути самостійним об'єктом вивчення. Це обмежувальна обставина побудови моделей природних процесів при прогнозуванні забруднення навколишнього середовища (НС) у зв'язку з уведенням нових потужностей, будівництвом і модернізацією промислових підприємств.

Узагальнення результатів досвіду варто шукати в тих областях теоретичної фізики, що розкривають фізичну сутність явищ і прибігають до вираження цих явищ мовою математики.

Моделювання (по Н.Ф.Реймерсу) – метод дослідження складних об'єктів, явищ і процесів шляхом їхнього спрощеного імітування (натурного, математичного, логічного). Ґрунтується на теорії подоби.

Модель – це 1) фізична (матеріально-натурне) чи знакова (математичне, логічне) звичайно спрощена подоба реального об'єкта, явища чи процесу; 2) зменшена подоба реального об'єкта: діюча модель чи тільки імітуюча форма чого-небудь, макет; 3) схема, зображення чи опис якого-небудь явища чи процесу в природі і суспільстві.

Моделювання процесів поширення домішок в НС повинно використовувати самі загальні закони природи, яким придається форма, що відповідає специфічним особливостям досліджуваного явища. Математичним апаратом моделювання є в основному диференціальні рівняння.

Розгляд ***явища*** з погляду фундаментальних законів відволікається від конкретних рис. Тому другий метод моделювання - теоретичний розгляд проблеми - дозволяє одержати найбільш загальний зв'язок між

істотними для явища величинами і характеризує властивості, притаманні усім явищам даного класу.

При теоретичному методі дослідження не представляється можливим прогнозувати природний процес без знань конкретних значень коефіцієнтів моделі.

Отже, повинні розроблятися методи, що доповнюють експериментальне дослідження науково обґрунтованим методом узагальнення даного одиничного досвіду. Однак всі узагальнення на цій основі носять дуже наближений і приватний характер.

Стосовно до атмосфери **моделлю** поширення забруднювальних речовин може служити будь-яка алгоритмічна чи аналогова система, що дозволяє імітувати процеси розсіювання домішок в атмосферному повітрі.

Допустимо, нам необхідно одержати інформацію про просторову мінливість концентрації шкідливих речовин (ШР) у повітрі і по експериментальним даним скласти надійну карту забруднення атмосфери (ЗА). Для цього варто систематично проводити відбір проб у вузлах регулярної сітки з кроком 1-2 км (задача практично нездійсненна). Одним зі способів відновлення полів концентрації є методи математичного моделювання (ММ) процесів, де основою є реальні умови. Реалізуються ці моделі на ЕОМ.

Таким чином, важливим елементом моделювання є якісна первинна інформація (її поставляє система моніторингу природних середовищ), що узагальнюється, аналізується. Зв'язок інформаційної й управлінської систем схематично можна зобразити так:

Спостереження (інформація)
Моніторинг - 〈 Оцінка (виявлення закономірностей) 〉- Нормування (керування) Прогноз (моделювання)

Важливого значення набувають методи ММ, які дозволяють більш досконально прогнозувати санітарний стан НС, розробляти оптимальні рекомендації з оздоровлення повітряного і водяного басейнів і ґрунтового середовища.

Для боротьби з ЗА можна використовувати комплекс заходів, серед яких: удосконалення технологій виробничих процесів і двигунів, герметизація устаткування, очищення димових і вентиляційних газів, розробка ефективних способів спалювання палива (газ), раціональне містобудування і т.д. Але знизити викиди до нуля неможливо. Тому велике значення мають розробки в області метеорологічних аспектів ЗА, що зв'язані насамперед із з дослідженням атмосферної дифузії, вивченням закономірностей поширення домішок і особливостей їхнього просторово-тимчасового розподілу. Це основа для об'єктивної оцінки стану

забруднення повітряного басейну і розробки можливих заходів щодо забезпечення чистоти атмосфери.
Самі характеристики ЗА зараз усі у більшому ступені розглядаються як метеорологічні елементи. Тому створення системи спостережень за ЗА й аналіз результатів стуляються з метеорологічними задачами. Звідси випливають задачі нормування ШР, прогноз ЗА і прогноз умов погоди, при яких можуть виникати небезпечні скупчення домішки в приземному шарі, задача глобального ЗА й ін.

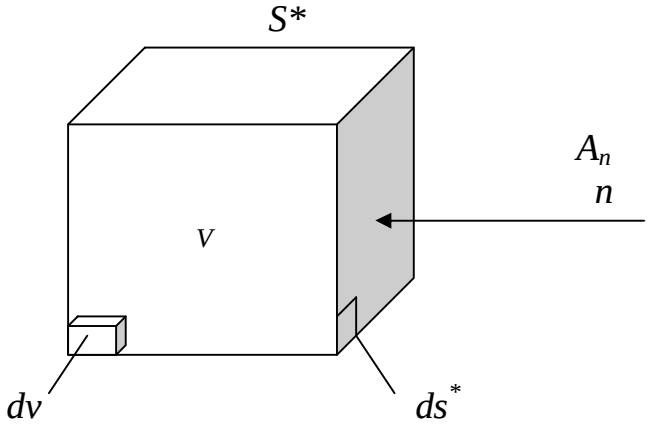
Рішення зазначених задач має загальну основу з вивченням атмосферної дифузії, оскільки процеси переносу домішки в атмосфері визначаються, головним чином, законами вихрового перемішування. Чітко ця спільність виявляється при побудові теоретичних моделей явищ, заснованих на рішенні рівняння турбулентної дифузії при відповідних крайових умовах. В усіх випадках потрібно знання турбулентних характеристик і розподіл метеорологічних елементів, що визначають механізм обміну в атмосфері.

Таким чином, поширення шкідливих домішок в атмосфері на близькі й особливо далекі відстані, їхня трансформація (перетворення одних в інші), випадання з атмосфери в значній мірі залежить від метеорологічних умов. Тому для розрахунку поширення домішок в атмосфері необхідно мати значення ряду метеорологічних параметрів (швидкість вітру, температура, вологість і т.д.). З іншого боку, домішки атмосфери роблять самі вплив на значення метеорологічних величин.

У зв'язку зі сказаним, задача розрахунку і прогнозу атмосферних домішок повинна вирішатись одночасно з задачею розрахунку і прогнозу метеорологічних величин. Ці дві задачі зважуються на основі рівняння балансу для атмосферних домішок і рівнянь гідротермодинаміки, що виражають основні закони фізики: збереження маси, кількості руху й енергії. У загальному виді ці закони виражаються у формі рівняння балансу.

1.2 Рівняння балансу для будь-якої субстанції

Нехай a – кількість будь-якої субстанції (маси, енергії й ін.) в одиниці маси повітря, тобто питома концентрація субстанції [кг/кг, г/г, мг/мг].
V – замкнутий обсяг;
S^* – поверхня цього замкнутого обсягу;
dv – елемент обсягу;
ds^* – елемент поверхні;
n - нормаль до поверхні;
A_n – швидкість руху субстанції по зовнішній нормалі до поверхні;
ε_a – приплив субстанції до одиниця об'єму (це може бути швидкість утворення або знищення субстанції);
ρ – щільність повітря.



Відповідно до основних законів фізики:

$$\iiint_V \frac{\partial \rho a}{\partial t} dv = -\iint_{S^*} \rho a A_n ds^* + \iiint_V \varepsilon_a dv \quad , \tag{1.1}$$

$\iiint_V \frac{\partial \rho a}{\partial t} dv$ - швидкість зміни кількості субстанції в обсязі V.

$-\iint_{S^*} a \rho A_n ds^*$ - повний потік (адвекція) субстанції через поверхню S*.

$\iiint_V \varepsilon_a dv$ - приплив субстанції в обсязі за рахунок внутрішніх причин.

Відповідно до теореми Гаусса-Остроградського, між інтегралами по поверхні й обсягу існує наступне співвідношення

$$\iint_{S^*} B_n ds^* = \iiint_V divB dv \quad . \tag{1.2}$$

Тут B – вектор;

B_n – проекція вектора на зовнішню нормаль до поверхні.

div B – об'ємна дивергенція вектора B. У декартовій системі записується у вигляді:

$$divB = \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} \tag{1.3}$$

B_x, B_y, B_z – проекції вектора B на осі X, Y, Z.

div- це число, що характеризує зміну потоку векторного поля в даному місці.

Прийнявши $B_n = a \rho A_n$, а $B = a \rho A$, запишемо

$$\iiint_V \frac{\partial \rho a}{\partial t} dv = -\iiint_V div(A \rho a) dv + \iiint_V \varepsilon_a dv \tag{1.4}$$

чи об'єднавши їх в один, одержимо

$$\iiint \left(\frac{\partial \rho a}{\partial t} + div\,(a\rho A) - \varepsilon_a\right) dv = 0 \qquad (1.5)$$

Оскільки це інтегральне співвідношення справедливе для будь-якого обсягу, то за умови безперервності і диференційності усіх вхідних функцій, вираженню (1.5) можна додати диференціальну форму:

$$\frac{\partial \rho a}{\partial t} + div\,(a\rho A) = \varepsilon_a \qquad (1.6)$$

Вираження (1.6) справедливо для ламінарного руху і являє собою рівняння балансу будь-якої субстанції (для ламінарного потоку). Для реальних середовищ, що практично завжди володіють у тім чи іншому ступені вираженою турбулентністю, необхідно перейти до рівняння балансу для осереднених величин. Розглянемо осереднення за часом.

Нехай будь-яка субстанція чи величина є *f=f(t)* - функція часу, а її осереднене значення:

$$\overline{f}(t) = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t)dt \qquad (1.7)$$

де T – період осереднення (10-20 хвилин);

$\overline{f}$ - осереднене за часом значення субстанції.

Будь-яку величину f можна представити як:

$$f = \overline{f} + f' \qquad (1.8)$$

де f' - деяка пульсація, відхилення величини від її середнього значення, обумовлене турбулентністю.

Для будь-яких субстанцій φ і f

$$\overline{\overline{f}} = \overline{f}; \qquad \overline{f'} = 0; \qquad \overline{(f+\varphi)} = \overline{f} + \overline{\varphi};$$

$$\overline{grad\, f} = grad\, \overline{f}; \qquad \overline{f\cdot\varphi} = \overline{f}\cdot\overline{\varphi} + \overline{f'\cdot\varphi'} \quad \text{і т.д.} \qquad (1.9)$$

Покладемо, що $a = \overline{a} + a'$; $A = \overline{A} + A'$; для щільності повітря приймемо $\rho = \overline{\rho}$, тому що мінливість щільності мала $\rho' = 0$.

Підставимо ці співвідношення в рівняння балансу, записане в диференціальній формі (1.6). Тоді за умови турбулентного перемішування маємо:

$$\frac{\partial \rho(\overline{a} + a')}{\partial t} + div\,(\rho[\overline{a} + a'][\overline{A} + A']) = \varepsilon_a\,. \qquad (1.10)$$

Зробимо осереднення. Тоді

$$\frac{\partial \rho \overline{a}}{\partial t} + div\ (\rho \overline{a} A) + div\ (\rho \overline{a' A'}) = \varepsilon_a\ . \qquad (1.11)$$

Вираження (1.11) являє собою рівняння балансу для будь-якої субстанції. На його основі можна одержати рівняння балансу атмосферних домішок, а також рівняння гідротермодинаміки [7].

1.3 Рівняння балансу атмосферних домішок

Як субстанцію ***a*** приймемо питому концентрацію атмосферної домішки. Швидкість руху А домішки в атмосфері представимо у виді

$$A = U + U_a\ , \qquad (1.12)$$

Де U – швидкість повітря;

U_a - власна швидкість домішки щодо нерухомого повітря. Вона може бути обумовлена силоміць Архімеда, а також імпульсом, що даний домішці в результаті емісії.

Ґрунтуючись на представленнях про атмосферну дифузію, можна записати

$$U = \overline{U} + U'\ , \qquad (1.13)$$

де $\overline{U}$ - середня швидкість;

U' - пульсація, обумовлена турбулентністю руху.

Для власної швидкості руху домішки

$$U_a = \overline{U_a}\ \ ,\qquad U_a' = 0\ . \qquad (1.14)$$

У більшому ступені це припущення справедливе для важких домішок, ніж для легких, тобто для тих, щільність яких більше щільності повітря.

Виходячи з сказаного, рівняння балансу (1.11) прийме вид:

$$\frac{\partial \rho \overline{a}}{\partial t} + div\ (\rho \overline{a}\,\overline{U}) + div\ (\rho \overline{a} U_a) + div\ (\rho \overline{a' U'}) = \varepsilon_a \qquad (1.15)$$

Введемо в розгляд об'ємну концентрацію домішки: $S=\rho a$ і турбулентний потік домішки $\rho \overline{a' U'} = \overline{s' U'} = Q_a$. Турбулентний потік домішки – це перенос маси домішки турбулентними часточками за одиницю часу через одиничну перпендикулярну поверхню $[Q_a]$ = кг/м^{2}с.

Врахуємо співвідношення векторного аналізу

$$div(SU) = UgradS + SdivU\ , \qquad (1.16)$$

$$UgradS = u\frac{\partial S}{\partial x} + \upsilon\frac{\partial S}{\partial y} + \omega\frac{\partial S}{\partial z}$$

u, υ, ω - проекції вектору U.

Приймемо, що *div U*=0, оскільки повітря практично нестискаємо. Рівняння балансу прийме вид (знак осереднення далі опускаємо):

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} + \upsilon\frac{\partial S}{\partial y} + \omega\frac{\partial S}{\partial z} + div(SU_a) + divQ_a = \varepsilon_a . \qquad (1.17)$$

Виразимо турбулентний потік домішки через осередненні величини. На основі напівемпіричної теорії турбулентності можна прийняти, що

$$Q_a = \overline{\rho a'U'} = -\rho K grad(a), \qquad (1.18)$$

де

$$K = [k_{ij}] = \begin{vmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{vmatrix}, \quad \begin{matrix} i = \overline{1;3} \\ j = \overline{1;3} \end{matrix} \qquad (1.19)$$

тензор, тобто величина особливого роду, що задається числами і законами їхнього перетворення.

Буквою К позначимо коефіцієнт турбулентної в'язкості, а індекси і, j при значенні 1; 2; 3 відповідають осям X, Y, Z.

Відомо, що повна похідна це

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} + \upsilon\frac{\partial S}{\partial y} + \omega\frac{\partial S}{\partial z} .$$

Тоді (17) можна переписати

$$\frac{dS}{dt} + \frac{\partial S u_a}{\partial x} + \frac{\partial S \upsilon_a}{\partial y} + \frac{\partial S \omega_a}{\partial z} - \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k_{ij}\frac{\partial a}{\partial x_j}) = \xi_a \qquad (1.20)$$

$u_a, \upsilon_a, \omega_a$ - проекції вектора U_a.

Приймемо, що головні осі координат тензора збігаються з осями використовуваної декартової системи координат. У цьому випадку

$$k_{xy} = k_{xz} = k_{yx} = k_{yz} = k_{zx} = k_{zy} = 0.$$

Позначимо

$$k_{xy} = k_x ;\ k_{yy} = k_y;\ k_{zz} = k_z$$

і врахуємо, що щільність повітря мало міняється по координатах (у порівнянні з іншими перемінними). Тоді рівняння балансу атмосферних домішок прийме вид:

$$\frac{dS}{dt} + (\frac{\partial S u_a}{\partial x} + \frac{\partial S \upsilon_a}{\partial y} + \frac{\partial S \omega_a}{\partial z}) - (\frac{\partial}{\partial x}k_x\frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}k_y\frac{\partial S}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial S}{\partial z}) = \varepsilon_a . \qquad (1.21)$$

$\frac{dS}{dt}$ - характеризує зміну концентрації домішки за рахунок швидкості переміщення повітря.

Член рівняння в першій дужці

$$(\frac{\partial Su_a}{\partial x}+\frac{\partial S\upsilon_a}{\partial y}+\frac{\partial S\omega_a}{\partial z})=div(SU_a) = - D \qquad (1.22)$$

визначає внесок у зміну концентрації домішки в рухомому обсязі повітря дивергенції потоку домішки, обумовленого власною швидкістю домішки U_a.. У випадку, якщо первісна швидкість домішки від джерела U_a мала, і домішка має щільність повітря («невагома» домішка), те D=0. У випадку ж «важкої чи легкої перегрітий» домішки $\omega_a \neq 0$. Тоді, зневажаючи первісною швидкістю домішки від джерела, тобто думаючи, що $u_a=\upsilon_a=0$, одержуємо

$$D = - \frac{\partial S\omega_a}{\partial z} = -S\frac{\partial \omega_a}{\partial z} - \omega_a \frac{\partial S}{\partial z} .$$

З цього вираження випливає, що у випадку $\omega_a \neq 0$, на зміну концентрації домішки впливають вертикальні градієнти як концентрації домішки, так і вертикальної швидкості домішки ω_a.

Член, що стоїть в рівнянні (1.21) у другій дужці

$$\frac{\partial}{\partial x}k_x\frac{\partial S}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}k_y\frac{\partial S}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial S}{\partial z} = L \qquad (1.23)$$

описує вплив турбулентної дифузії на зміну концентрації домішки.

Перейдемо до аналізу припливів домішки, тобто розглянемо величину ε_a . Припливи домішки можуть мати різні джерела і походження.

Як в атмосфері, так і особливо на земній поверхні можуть існувати самі різні джерела домішки. Нехай розподіл цих джерел у просторі і часі є відомою функцією

$$F = F(x, y, z, t).$$

Кожна з домішок, що знаходяться в атмосфері, може вступати в хімічні реакції з іншими домішками чи частками повітря. У результаті цього може утворитися нова домішка чи ж відбутися її зникнення. У цьому випадку ми будемо мати джерело домішки P (як наслідок фізико-хімічних процесів в атмосфері) чи її стік, що позначимо R.

Частина домішок може «захоплюватися» вологою і «вимиватися» з атмосфери опадами. Цю частину домішки позначимо W.

Таким чином, повний приплив домішки можна записати

$$\varepsilon_a = F + P - R - W. \qquad (1.24)$$

З огляду на все сказане, найбільш повний вид рівняння балансу атмосферних домішок у турбулентному середовищі наступний

$$\frac{dS}{dt}+(\frac{\partial Su_a}{\partial x}+\frac{\partial S\upsilon_a}{\partial y}+\frac{\partial S\omega_a}{\partial z})-(\frac{\partial}{\partial x}k_x\frac{\partial S}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}k_y\frac{\partial S}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial S}{\partial z})=F+P-R-W \ .(1.25)$$

1.4 Початкові і граничні умови

З огляду на вираження для повної похідної

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} + \upsilon\frac{\partial S}{\partial y} + \omega\frac{\partial S}{\partial z} \ ,$$

і думаючи $u_a = \upsilon_a = 0$, перепишемо рівняння балансу атмосферних домішок

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} + \upsilon\frac{\partial S}{\partial y} + \omega\frac{\partial S}{\partial z} + \frac{\partial S\omega_a}{\partial z} - (\frac{\partial}{\partial x}k_x\frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}k_y\frac{\partial S}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial S}{\partial z}) = F + P - R - W \ . \tag{1.26}$$

Будемо вважати, що власна вертикальна швидкість домішки ω_a і приплив домішки ε_a відомі

$\omega_a = \omega_a(x, y, z, t)$; $\varepsilon_a = \varepsilon_a(x, y, z, t)$.

Тоді рівняння (1.26) містить 7 невідомих перемінних : S, u, υ, ω, k_x, k_y, k_z.

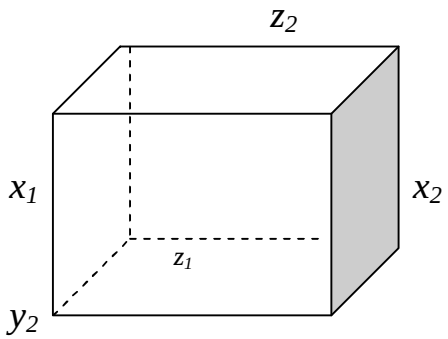
Шість з них крім S можна визначити шляхом рішення чисельної моделі атмосфери. Тоді рівняння (1.26) буде містити лише одну перемінну – S. Оскільки рівняння має лише одну першу похідну за часом, то необхідно задати одну початкову умову:

$$t = t_0, \qquad S = S_0(x, y, z), \tag{1.27}$$

де $S_0(x, y, z)$ – відома функція координат.

Іншими словами, у момент часу t_0 розподіл концентрації домішки S у просторі відомий.

Рівняння (1.26) містить другі похідні по всім трьох координатах. Отже, для його рішення необхідно задати по дві граничних умови для всіх трьох координатах. Для простоти будемо вважати, що рішення рівняння (1.26) шукаємо в прямокутній області з нижньою і верхньою границями, що є горизонтальними площинами $z=z_1$, $z=z_2$. У якості нижній границі може виступати підстилаюча поверхня [$z_1 = 0$], а верхньої - умовна верхня границя, яку позначимо [$z_2 = H$] чи [$z_2 \to \infty$].



Бічні границі області розрахунку приймемо як вертикальні площини

$x=x_1, \quad x=x_2,$
$y=y_1, \; y=y_2.$

В окремому випадку може бути розглянута нескінченна область, тобто $x \to \pm\infty$; $y \to \pm\infty$.
При обмеженій області граничні умови в самому загальному виді можна записати:

$$\begin{cases} x = x_1 & S = S_{x1} \\ x = x_2 & S = S_{x2} \end{cases} \quad \begin{cases} y = y_1 & S = S_{y1} \\ y = y_2 & S = S_{y2} \end{cases} \quad \begin{cases} z = z_1 & S = S_{z1} \\ z = z_2 & S = S_{z2} \end{cases} \qquad (1.28)$$

Зміст цих граничних умов полягає в тім, що на кожній із границь значення шуканої функції задаються.

У випадку необмеженої області розрахунку часто задається звертання шуканої функції в нуль при безмежному віддаленні від початку координат. Це виражається за допомогою умов

$$\begin{matrix} x \to \pm\infty & S \to 0 \\ y \to \pm\infty & S \to 0 \end{matrix} \cdot \qquad (1.29)$$

У випадку, коли верхня границя області $z_2=H$ знаходиться високо, то ставиться умова або звертання в нуль самої функції, або вертикального турбулентного потоку домішки, тобто

$$\text{при} \quad z_2=H \qquad S=0 \;\; \text{чи} \quad k_z \frac{\partial S}{\partial z} = 0. \qquad (1.30)$$

У граничному випадку

$$\text{при} \quad z \to \infty \qquad S \to 0 \qquad k_z \frac{\partial S}{\partial z} \to 0 \qquad (1.31)$$

Особливе значення має постановка граничної умови на нижній границі області інтегрування, якщо нею є підстилаюча поверхня, що може мати два істотно різних види:

1) водяна поверхня;
2) ґрунт, сніг, рослинний покрив.

Водяна поверхня цілком поглинає домішку, що надходить до неї. Це можна записати умовою

$$\text{при} \quad z=0, \qquad S=0. \qquad (1.32)$$

У випадку твердої підстилаючої поверхні, чи рослинності мають місце два протилежних процеси: поглинання і відбиття домішки, що надходить до поверхні з атмосфери.

Розглянемо випадок відсутності власної вертикальної швидкості [$\omega_a=0$]. Якщо земна поверхня відбиває падаючий на неї потік домішки цілком, то граничну умову запишемо у виді:

$$\text{при} \;\; z=0; \quad k_z \frac{\partial S}{\partial z} = 0 \quad . \qquad (1.33)$$

Якщо поверхня відбиває лише частину домішки, то якась частина домішки повинна осісти на ній (сухе осадження). Тоді цю частину потоку домішки виразимо як βS, де β - деякий коефіцієнт, що враховує ці процеси. У цьому випадку граничні умови приймають вид:

$$\text{при} \quad z=0; \qquad k_z \frac{\partial S}{\partial z} - \beta S = 0. \tag{1.34}$$

Якщо ми маємо справу з «важкою» домішкою [$\omega_a<0$], то в цьому випадку потік домішки, що надходить до поверхні в результаті розходження щільності домішки і повітря, виразиться у виді: $-\omega_a$. Якщо цей потік врахувати в умові балансу потоків домішок на поверхні, то гранична умова на поверхні прийме вид:

$$\text{при} \quad z=0; \qquad k_z \frac{\partial S}{\partial z} - \beta S - \omega_a S = 0 \quad . \tag{1.35}$$

З останньої умови (1.35) граничні умови (1.32)-(1.34) можна одержати як окремі випадки. Думаючи в (1.35) $\beta \to \infty$ одержуємо (1.32), прийнявши $\omega_a=0$ і $\beta=0$, одержуємо (1.33). І нарешті, поклавши $\omega_a=0$, одержимо умову (1.34). Таким чином, (1.35) – це загальний вид нижньої граничної умови.

1.5 Вплив орографії на поширення домішки від джерела

Вплив орографії дуже складний і виявляється, головним чином, через метеорологічний режим, що виникає в гірських районах. Своєрідність вітрового режиму (гірничо-долинні вітри), хмарності й опадів у гірських районах приведе до посилення чи ослаблення процесів трансформації домішки чи її видаленню з атмосфери. При цьому особливо важливе значення мають вертикальні рухи повітря і посилення турбулентності, обумовлені орографією.

Розглянемо окремий випадок: процес поширення важкої домішки, що має спадну власну швидкість осадження ω_a, на навітряній і підвітряній сторонах великого гірського масиву з рівною поверхнею, висота якого $Z = \xi(x)$ залежить тільки від X (рис.1.1).

Нехай швидкість потоку повітря u (без обліку впливу гірського масиву), що рухається до навітряної і по підвітряній сторонах гірської системи, спрямована уздовж осі X и не залежить від висоти. У цьому випадку над горами виникає вертикальна складова швидкості повітря

$$\omega_0 = u \frac{\partial \xi}{\partial x}. \tag{1.36}$$

Тоді на навітряній стороні гірської системи $\frac{\partial \xi}{\partial x} > 0 \Rightarrow \omega_0 > 0$.

На підвітряній стороні гірської системи $\frac{\partial \xi}{\partial x} < 0 \Rightarrow \omega_0 < 0$.

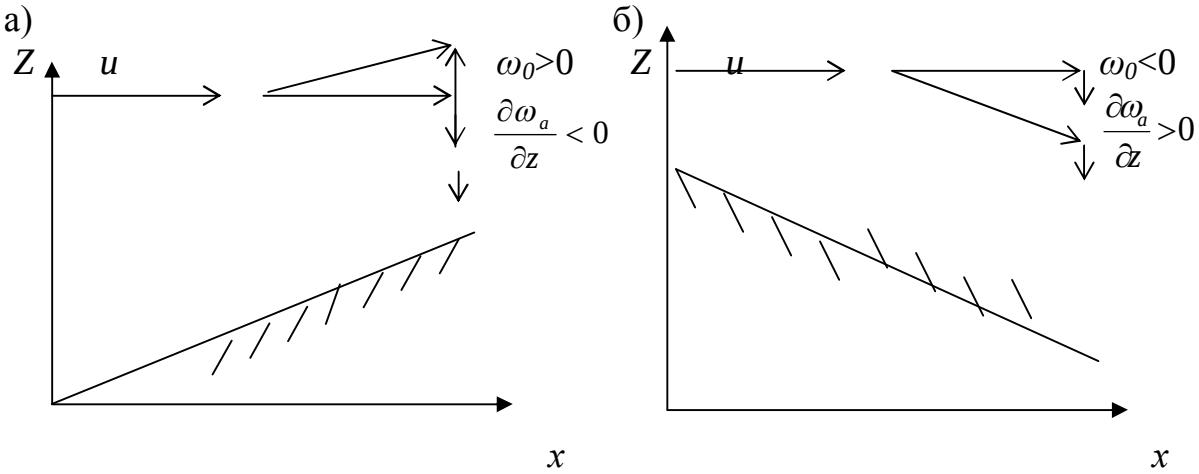


Рис. 1.1 - Схема руху повітря і важкої домішки на навітряній (а) і підвітряній (б) сторонах гірського масиву [7]

Виникаючі вертикальні швидкості повітря, завдяки тертю об важкі частки домішки, будуть приводити до *ослаблення біля земної поверхні спадних рухів* домішки ω_a на навітряній стороні гори і до їхнього посилення на стороні. Це приведе до того, що на навітряній стороні будемо мати $\frac{\partial \omega_a}{\partial z} < 0$, а на підвітряній - $\frac{\partial \omega_a}{\partial z} > 0$.

На підставі рівняння балансу приймемо для зміни концентрації за рахунок дивергенції власної швидкості часток ω_a можна написати

$$\frac{ds}{dt} = -\frac{\partial s\omega_a}{\partial z}; \quad \text{чи} \quad \frac{\partial s\omega_a}{\partial z} = s\frac{\partial \omega_a}{\partial z} + \omega_a \frac{\partial s}{\partial z}. \tag{1.37}$$

Вважаємо, що для випадку незалежності концентрації від висоти поблизу поверхні гір (вертикальний градієнт $\frac{\partial s}{\partial z} = 0$)

$$\frac{ds}{dt} = -s\frac{\partial \omega_a}{\partial z}. \tag{1.38}$$

Як уже говорилося, на навітряній стороні гір $\frac{\partial \omega_a}{\partial z} < 0$, отже, $\frac{ds}{dt} > 0$, тобто йде нагромадження домішки.

На підвітряній стороні $\frac{\partial \omega_a}{\partial z} > 0$, отже, $\frac{ds}{dt} < 0$ - йде розсіювання домішки.

При складних вертикальних рухах унаслідок зміни напрямку потоку повітря (вітру), підприємства ризиковано будувати в умовах складної орографії.

1.6 Поширення пасивних атмосферних домішок від миттєвих джерел при постійному коефіцієнті турбулентності

Пасивні домішки - це домішки, що не вступають до реакції з іншими домішками і частками повітря.

Розглянемо випадок поширення легкої домішки, тобто щільність домішки дорівнює щільності повітря. Розглянемо випадок поширення такої домішки в нерухомому повітрі під впливом турбулентної дифузії при відсутності безупинно діючих джерел. У цьому випадку власна швидкість осадження $\omega_a=0$, складові швидкості вітру також рівні 0:

$$\varepsilon_a = \omega_a = u = v = w = 0$$

Тоді рівняння балансу атмосферної домішки приймає вид рівняння турбулентної дифузії:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} k_x \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} k_y \frac{\partial S}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial S}{\partial z} \qquad (1.39)$$

У найпростішому випадку, коли

$$k_x = k_y = k_z = const$$

рівняння (1.39) можна записати

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k\Delta S \quad , \qquad (1.40)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad , \qquad (1.41)$$

де Δ - лапласіан (оператор).

Помістимо початок декартової системи координат у деяку крапку простору на деякій висоті і розглянемо поширення домішки у всьому просторі.

Нехай при t=0 початковий розподіл домішки є відома функція координат, тобто

при $t=0$ $\quad S=S_0(x,y,z)$. (1.42)

Тоді рішення рівняння (1.40) будемо шукати при початкових умовах (1.42) у всьому просторі при граничних умовах:

$$\begin{aligned} x &\to \pm\infty \qquad S \to 0 \\ y &\to \pm\infty \qquad S \to 0 \\ z &\to \pm\infty \qquad S \to 0 \end{aligned} \qquad (1.43)$$

Рівняння (1.40) аналогічно рівнянню теплопровідності. Його рішення прийнято шукати методом Фур'є з використанням інтеграла Фур'є. Воно має вид

$$S(x, y, z, t) = \int \int_{-\infty}^{+\infty} \int S_0(x', y', z') G dx' dy' dz' \quad , \qquad (1.44)$$

де G – функція впливу миттєвого крапкового джерела (функція джерела). Вона показує, яким образом миттєві крапкові джерела домішки,

що знаходяться в будь-якій крапці простору, впливають на величину домішки в кожній крапці в будь-який момент часу *t:*

$$G = \frac{1}{(\sqrt{4\pi kt})^3}\exp[-\frac{(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2}{4kt}]. \qquad (1.45)$$

В одномірному випадку, коли

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \qquad (1.46)$$

при початкових умовах t=0, $S=S_0(x)$

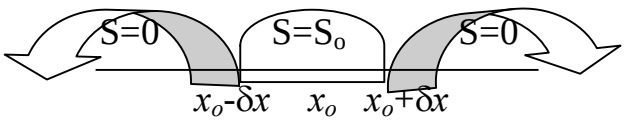
для концентрації домішки по осі *x* маємо:

$$S(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S_0(x')G_1 dx' , \qquad (1.47)$$

де

$$G_1 = \frac{1}{(\sqrt{4\pi kt})}e^{-\frac{(x-x')^2}{4kt}} . \qquad (1.48)$$

Для виявлення фізичного змісту функції впливу G_1 розглянемо одномірний випадок, для якого *S* у початковий момент часу дорівнює 0 у всіх крапках, крім малого елемента 2δx на осі *x* $(x_o-\delta x,\ x_o+\delta x)$ поблизу крапки x_o .



Поблизу крапки x_o при $t=0$ $S=S_0$. Тоді рішення можна записати так:

$$S(x,t) = \frac{S_0}{(\sqrt{4\pi kt})}\int_{x_0-\delta x}^{x_0+\delta x} e^{-\frac{(x-x')^2}{4kt}}dx' . \qquad (1.49)$$

Відповідно до теореми про середній можна записати:

$$\int_{x_0-\delta x}^{x_0+\delta x} e^{-\frac{(x-x')^2}{4kt}}dx' = 2\delta x\exp[-\frac{(x-x_0)^2}{4kt}] . \qquad (1.50)$$

У цьому випадку для одномірного випадку для миттєвого крапкового джерела одержуємо:

$$S(x,t) = \frac{S_0}{(\sqrt{4\pi kt})}2\delta x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4kt}} . \qquad (1.51)$$

Нехай на відрізку $2\delta x$ існує миттєве лінійне джерело потужністю M_1. M_1 – кількість домішки, виділена одиницею довжини джерела в одиницю часу). Це джерело створює уздовж осі *x* потік домішки

$$Q = \frac{M_1}{l} , \qquad (1.52)$$

де l – одиниця довжини джерела.

Якщо джерело діє час δt, то концентрацію домішки на відрізку $2\delta x$ можна виразити у виді:

$$S_0 = \frac{\delta t Q}{2\delta x} = \frac{\delta t M_1}{l 2\delta x} \quad . \tag{1.53}$$

Тоді рішення для $S(x,t)$ у формі (1.51) для випадку x_o =0 можна переписати

$$S(x,t) = \frac{\delta t Q}{(\sqrt{4\pi k t})} e^{-\frac{x^2}{4kt}} \tag{1.54}$$

чи з урахуванням вираження для G_1 для лінійного джерела:

$$S(x,t) = \delta t Q \cdot G_1(x,t) \tag{1.55}$$

Функція впливу G_1 визначає розподіл концентрації домішки уздовж осі X при наявності миттєвого лінійного джерела потужністю M_1.

Функцію впливу G у тривимірному просторі можна інтерпретувати аналогічно, тільки в цьому випадку функціонує миттєве крапкове джерело в крапці $x=x_0$, $y=y_0$, $z=z_0$. Якщо в момент часу $t=0$ у крапці $x=y=z=0$ мається миттєве джерело потужністю M_2. Тоді рішення буде мати вид:

$$S(r,t) = \frac{M_2}{(\sqrt{4\pi k t})^3} e^{-\frac{r^2}{4kt}}, \tag{1.56}$$

де

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad . \tag{1.57}$$

З рівняння (1.56) випливає, що при фіксованому часі t концентрація домішки в просторі буде зменшуватися зі збільшенням відстані r між крапкою простору і джерелом. У будь-якій фіксованій крапці простору концентрація домішки при збільшенні часу зменшується, так що при $t \to 0$, $S \to 0$. Цей процес можна спостерігати при поширенні миттєво виниклого клуба диму на усе більший простір.

Розглянемо випадок наявності деякого стійкого незалежного від координат і часу потоку. Направимо вісь X уздовж потоку. Тоді можна записати

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} = k\Delta S \tag{1.58}$$

u – швидкість потоку уздовж осі X.

Введемо перемінну

$$\xi = x - ut. \tag{1.59}$$

Користаючись правилами заміни незалежних перемінних

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi}; \qquad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}$$

можна записати замість (1.58)

$$\frac{\partial S}{\partial t} = K\Delta_1 S, \qquad (1.60)$$

де $\Delta_1 = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Рівняння (1.60) аналогічно рівнянню (1.40), тоді його рішення має вид (1.56), у якому замість r приймається $\tilde{r}$:

$$S(\tilde{r}, t) = \frac{M_2}{(\sqrt{4\pi kt})^3} e^{-\frac{\tilde{r}^2}{4kt}}, \qquad (1.61)$$

де $$\tilde{r}^2 = (x - ut)^2 + y^2 + z^2 \quad . \qquad (1.62)$$

Аналіз рівняння показує, що поширення домішки обумовлене не тільки турбулентною дифузією, але і швидкістю руху повітря. Іншими словами, якщо взяти клуб диму, то він буде поширюватися у виді кулі разом з повітрям, що рухається, зі швидкістю *u* при одночасному збільшенні радіуса цієї кулі.

1.7 Рівняння балансу атмосферних домішок при стаціонарних процесах при постійному напрямку вітру

При дослідженні поширення атмосферних домішок поблизу їхніх джерел правомірно розглянути випадок, коли характеристики атмосфери і концентрації домішок у часі не змінюються, тобто ми спостерігаємо стаціонарний процес. При наявності одного чи декількох крапкових чи лінійних джерел можна при цьому обмежитися невеликим обсягом простору (десятки кілометрів по горизонталі і сотні метрів по вертикалі, що відносять до мезомасштабу). У такій постановці задача розсіювання атмосферних домішок поблизу їхніх джерел детально вивчена М.Е.Берляндом і Н.Л. Бизовой [1].

Припустимо, що в зазначеному обсязі повітря напрямок його руху з висотою не змінюється. Направимо вісь *X* уздовж вектора вітру і покладемо, що власна швидкість домішки в цьому обсязі повітря постійна. За таких умов рівняння балансу домішки можна записати

$$u\frac{\partial s}{\partial x} + \omega_a \frac{\partial s}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} k_x \frac{\partial s}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} k_y \frac{\partial s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial s}{\partial z} \qquad (1.63)$$

Порівняємо по порядку величин перші члени правої і лівої частини рівняння. Приймемо для оцінних розрахунків наступні значення:

$$D(\partial x) = L = 10^4; \qquad D(S) = S_0;$$

$$D(u) = V = 10; \qquad D(k_x) = K_x = 10 \qquad (1.64)$$

$$D(u\frac{\partial s}{\partial x}) = \frac{VS_0}{L}; \qquad D(\frac{\partial}{\partial x} k_x \frac{\partial s}{\partial x}) = \frac{K_x S_0}{L}; \qquad (1.65)$$

Візьмемо відношення порядків цих величин

$$D(u\frac{\partial s}{\partial x}) \div D(\frac{\partial}{\partial x}k_x\frac{\partial s}{\partial x}) = \frac{VS_0}{L}\cdot\frac{L^2}{K_x S_0} = \frac{V\cdot L}{K} = \frac{10\cdot 10^4}{10} = 10^4 \ . \qquad (1.66)$$

Відношення показує, що другий член малий у порівнянні з першим і ним можна зневажити. Ця обставина відбиває той факт, що домішки ніколи не поширюються проти вітру:

$$u\frac{\partial s}{\partial x} >> \frac{\partial}{\partial x}k_x\frac{\partial s}{\partial x} \ .$$

Тоді рівняння балансу буде мати вид:

$$u\frac{\partial s}{\partial x} + \omega_a\frac{\partial s}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y}k_y\frac{\partial s}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial s}{\partial z} . \qquad (1.67)$$

Припустимо, що крапкове джерело знаходиться в крапці з координатами: $x=x_1$, $y=y_1$, $z=z_1$. Тоді можна прийняти, що потік домішки виражається за допомогою дельта-функції Дирака

$$\varepsilon_a(x_1, y_1, z_1) = M\delta(x)\delta(y)\delta(z) \ ,$$

де M - потужність джерела, за час його дії - δt;

δ (x) , δ (y) , δ (z) – дельта-функції.

Сформулюємо граничні умови. Помістимо джерело потужністю M в крапку $X=Y=0$, $Z=H$. Це джерело створює конвективний потік домішки уздовж осі X. Величина цього потоку приймається як одна з граничних умов, тобто при X=0

$$Q = U\cdot S = \frac{M}{l^2} = M\delta(y)\delta(z-H) , \qquad (1.68)$$

l^2- одиниця площі.

Інші граничні умови приймаються як і раніше, тобто

При $x \to \pm\infty$ $S \to 0$.

При $y \to \pm\infty$ $S \to 0$.

При $z=H$ $S=0$ чи $k_z\frac{\partial s}{\partial z} = 0$.

При $z \to \infty$ $S \to 0$ чи $k_z\frac{\partial s}{\partial z} \to 0$.

При $z=0$, $S=0$ (повне поглинання домішки підстилаючою поверхнею), чи $k_z\frac{\partial s}{\partial z} = 0$ (повне відображення домішки поверхнею),

чи $k_z\frac{\partial s}{\partial z} - \omega_a s - \beta s = 0$ (частина домішки поглинається, а частина осаджується - сухе осадження).

Якщо обмежитися випадком легкої домішки, коли ω_a = 0, тобто вертикальний потік домішки у земної поверхні відсутній, тоді граничні умови приймуть вид

при $z=0$, $k_z\frac{\partial s}{\partial z} = 0$,

$$\text{при} \quad \left.\begin{array}{l} z \to \infty \\ y \to \pm\infty \\ x \to \pm\infty \end{array}\right\} \quad S \to 0 .$$

1.8 Рішення рівняння балансу атмосферних домішок при стаціонарних процесах для приграничного шару атмосфери

Головна особливість приграничного шару атмосфери - це значна зміна швидкості і напрямки вітру з висотою. При цьому в самій нижній частині прикордонного шару (у приземному шарі, товщина якого 40-50 метрів) напрямок вітру не змінюється. Існують різні теорії і рівняння, що описують ці зміни.

Використовуємо так називаний ступеневий закон зміни швидкості вітру з висотою, тобто

$$u = u_1 (\frac{z}{z_1})^n \ , \tag{1.69}$$

де z_1 - деяка висота, близька земної поверхні (z_1=1 м);

u_1 - швидкість вітру на цій висоті;

n - деякий коефіцієнт, що залежить від метеоумов, особливо від температурної стратифікації:

n = 0.15-0.50 при стійкій стратифікації,

n = 0.1-0.15 при нестійкій стратифікації.

Якщо відомі швидкості вітру на різних висотах z_1 і z_2, тоді коефіцієнт для шару між цими висотами можна обчислити по співвідношенню

$$n = \frac{\lg(\frac{u_2}{u_1})}{\lg(\frac{z_2}{z_1})} \quad . \tag{1.70}$$

Коефіцієнт турбулентності [k_z], що описує турбулентне змішування у вертикальному напрямку, залежить від ряду умов. У прикордонному шарі атмосфери він, як правило, збільшується з висотою:

$$k_z = k_1 (\frac{z}{z_1})^m \quad , \tag{1.71}$$

де k_1 - значення коефіцієнта турбулентності на висоті Z_1, m - коефіцієнт.

Значення коефіцієнта турбулентності на висоті z_1 залежить від термічної стратифікації і швидкості вітру. Він більше при нестійкій стратифікації і менше при стійкій. При звичайних умовах при $z=1$ м, k_1= 0,1-0,2 м^2/с.

Коефіцієнт m, також як і k_1, залежить від температурної стратифікації і розподілу швидкості вітру з висотою. При байдужній стратифікації m=1 (у середніх умовах).

Турбулентне перемішування по горизонталі (по осі Y) набагато слабкіше, ніж по вертикалі. Однак воно має місце і його необхідно враховувати. З фізичних розумінь можна прийняти, що величина цього перемішування пропорційнаі швидкості вітру

$$k_y = k_0 u \quad , \tag{1.72}$$

де u - швидкість вітру [м/с];

k_0 - постійна [м];

k_y - коефіцієнт турбулентності по горизонталі.

Тоді з обліком (1.69) можна записати:

$$k_y = k_0 u_1 (\frac{z}{z_1})^n \quad . \tag{1.73}$$

Значення коефіцієнта k_0 визначається на основі експериментальних даних. При нестійкій стратифікації атмосфери k_0=0,5-1 м, при стійкій стратифікації k_0 = 0,1-0,5 м.

При зроблених припущеннях щодо залежності перемінних u_1, k_y, k_z від висоти, рівняння балансу атмосферних домішок є лінійним диференціальним рівнянням другого порядку з перемінними коефіцієнтами u_1, k_y, k_z, що залежать від висоти.

Для спрощення приймемо, що концентрація S:

$$S(x, y, z) = P(x, y)\ S'(x, z) \quad , \tag{1.74}$$

Де $P\ (x,\ y)$ описує поширення домішки уздовж осей X, Y від крапкового джерела; $S'(x, z)$ описує розподіл домішки уздовж осей X і Z від нескінченного лінійного джерела, що знаходиться на осі Y, тобто перпендикулярно напрямку вітру. При цьому потужності викидів крапкового і лінійного джерела збігаються чисельно. Однак у випадку лінійного джерела значення потужності відноситься до одиниці довжини.

Для перемінної $P\ (x, y)$ приймемо, що вона задовольняє рівнянню і граничним умовам

$$\frac{\partial P}{\partial x} = k_0 \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \tag{1.75}$$

при $x=0$ $P = \delta\ (y)$,

при $y \to \pm\infty$ $P \to 0$. (1.76)

Рішення рівняння (1.75) при умовах (1.76) має вид

$$P = \frac{1}{\sqrt{4k_0 \pi x}} e^{-\frac{y^2}{4k_0 x}} . \tag{1.77}$$

Помітимо, що (1.77) формально збігається з рівнянням (1.48) для функції *s(x,t)*, якщо в (1.48) замість *t* підставити *x*, а замість *x* і 1 підставити $Q\delta$ *t* ,. Однак замість початкової умови при *t=0* $S = S_0(x)$ у даному випадку ми маємо граничну умову *x=0* $P = \delta(y)$.

Підставляючи вираження для *S* у виді (1.74) у рівняння балансу домішки (1.67) і з огляду на (1.75), для перемінної *S'(x,z)* одержимо наступне:

$$u\frac{\partial s'}{\partial x} + \omega_a \frac{\partial s'}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial s'}{\partial z}. \qquad (1.78)$$

Граничні умови для перемінної *S'* одержимо з граничних умов для перемінної *S*, при обліку (1.76) для перемінної P (x, y) :

При $x=0$ $\quad Q_1 = U \cdot S' = M\delta(z-H)$.

При $z=0$, $\quad k_я \frac{\partial s'}{\partial z} = 0 \qquad (1.79)$

При $z \to \infty$ і $x \to \infty$ $\quad S' \to 0$

Рішення рівняння для S' (1.78) шукають методом Фур'є при використанні властивостей дельта-функції. Тоді при $\omega_a = 0$, по Берлянду М.Е. [1], рішення рівняння (1.74)

$$S(x,y,z) = \frac{M(z-H)^{\frac{1-m}{2}} \cdot z_1^m}{(2+n-m)k_1\sqrt{4\pi k_0 x^3}} \cdot e^{-\frac{y^2}{4k_0 x}} \cdot e^{-\frac{u_1 z_1^{m-n}(z^{2+n-m}+H^{2+n-m})}{k_1(2+n-m)} \cdot I_\alpha(\beta)},$$

(1.80)

де порядок $\alpha = -\frac{1-m}{2+n-m}$; і аргумент $\beta = \frac{2u_1 z_1^{m-n}(H-z)^{2+n-m}}{(2+n-m)^2 k_1 x}$ функції Бесселя.

1.9 Чисельне моделювання процесів забруднення атмосфери великих міст і їхнього впливу на термічний режим атмосфери

У великих містах зосереджені промислові комплекси, що викидають в атмосферу величезна кількість газоподібних і твердих відходів виробництва. У побутових цілях спалюється тверде, рідке і газоподібне паливо, що супроводжується викидом в атмосферу різних домішок і виділенням тепла.

Різні інгредієнти «скидаються» на земну поверхню й у водяні басейни, стан яких впливає на нижні шари атмосфери. Житлова і промислова забудови, характер обробки ґрунту, стан рослинного покриву впливають на фізичні властивості земної поверхні, зокрема на її теплоємність, відбивну здатність і «шорсткість». Це приводить у зонах великих міст до значної зміни складу і властивостей атмосфери, до її забруднення. А ЗА

впливає на перетворення сонячної радіації, у результаті чого змінюються процеси теплообміну в атмосфері, а також процеси фотосинтезу.

Керування господарською діяльністю і, зокрема, викидами промислових об'єктів можуть дати позитивний ефект, якщо воно робиться на науковій основі. Одним з головних при цьому є метод чисельного моделювання процесів, що приводять до зміни природного середовища під впливом господарської діяльності суспільства, тобто під впливом антропогенних факторів.

Це відноситься і до моделювання процесів ЗА і зміни термічного режиму атмосфери. Мається велике число досліджень, де ця задача була поставлена і вирішена стосовно до деяких приватних умов.

Якщо в попередніх лекціях були викладені теоретичні основи і методи розрахунку поширення атмосферних домішок від різних джерел, то зараз за допомогою приведених раніше й аналогічних формул для концентрації атмосферних домішок може бути змодельований процес поширення ЗА для умов великих міст, якщо відоме розташування і продуктивність джерел.

Якщо провести моделювання процесу поширення шкідливої домішки у великому місті при обліку усіх більш-менш значних джерел, то шляхом «виключення» з нього декількох великих джерел, можна установити вплив на ЗА окремих груп джерел. На основі такого роду експериментів можна знайти «оптимальний» розподіл і визначити граничні потужності джерел для забезпечення умов для найменшого ЗА. Такий спосіб моделювання процесу ЗА корисний для одержання практичних рекомендацій розміщення знову споруджуваних і реконструкції вже існуючих підприємств. Однак він містить ряд недоліків: припущення про стаціонарність процесів і завдання розподілу метеорологічних параметрів. Метеопараметри, що входять у рівняння балансу домішок, залежать від часу і самі повинні розраховуватися при рішенні більш загальної задачі про просторово-тимчасовий розподіл метеопараметрів і ЗА. Ця загальна задача містить у собі й облік впливу ЗА на метеорологічний режим.

<u>Постановка задачі.</u> Будемо виходити з того, що процеси ЗА і зміна метеоелементів під впливом великих міст відбуваються тільки усередині планетарного прикордонного шару (ППШ) висотою $h \approx$ 1-2 км, особливо в його нижній частині висотою $h_1 \approx$ 50 м [7]. У такому випадку при площі міста 50 * 50 км^2 для рішення поставленої задачі досить розглянути ділянку атмосфери з горизонтальними розмірами порядку сотень кілометрів, вертикальними 1-2 км. Це мезометеорологічний полігон, що включає в себе поверхневий шар ґрунту товщиною порядку $d \approx 20$ см, а задачу розрахунку метеорологічного режиму і поширення забруднень у ньому як мезометеорологічну. Відповідно до цього як гідродинамічну основу задачі можна прийняти рівняння гідротермодинаміки мезопроцесів.

Обмежимося далі розглядом випадка моделювання метеорологічного процесу і поширення забруднень за добу. Значення метеорологічних

елементів, а також концентрації атмосферних домішок поза мезометеорологічного полігону будемо вважати відомими. Їх можна розрахувати на основі чисельної прогностичної моделі великомасштабних атмосферних процесів. Невідомими ж будуть значення метеорологічних елементів і концентрації ШР усередині мезометеорологічного полігона. При цьому розподіл і потужність джерел забруднень, а також фізичні властивості підстилаючої поверхні (її рельєф, забудови, лісопаркові зони і т.д.) повинні бути задані.

З фізичних розумінь ясно, що властивості підстилаючої поверхні, а також нерівномірний розподіл забруднень у просторі повинні впливати на процеси конвекції, утворення хмарності й опадів. Однак ці процеси можуть бути розглянуті і враховані ізольовано від поставленої задачі. Через це тут не будуть розглянуті також припливи тепла, зв'язані з фазовими переходами, а також процеси, обумовлені нестатичністю атмосферних рухів. Останнє означає, що рівняння гідротермодинаміки макропроцесів будуть узяті в наближенні квазистатичності, тобто при використанні рівняння статики.

Ґрунтуючись на оцінках порядків величин окремих членів рівнянь, можна показати, що при рішенні поставленої задачі членами рівнянні, що описують ефект турбулентної в'язкості, обумовлений турбулентними пульсаціями швидкості в горизонтальному напрямку, можна зневажити. Крім того, атмосферні рухи в мезометеорологічному полігоні можна прийняти нестисливими ($d\rho / dt = 0$), що також підтверджується оцінками порядків величин.

У відповідності зі сказаним для рішення зазначеної задачі візьмемо рівняння горизонтального руху у виді:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z} = l(v - v_g) + \frac{\partial}{\partial z}k\frac{\partial u}{\partial z}, \tag{1.81}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z} = -l(u - u_g) + \frac{\partial}{\partial z}k\frac{\partial v}{\partial z}. \tag{1.82}$$

Рівняння нерозривності

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \tag{1.83}$$

Рівняння припливу тепла

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{\partial T}{\partial x} + v\frac{\partial T}{\partial y} + w\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{c_p\rho}\varepsilon_л + \frac{\partial}{\partial z}k\frac{\partial T}{\partial z}. \tag{1.84}$$

Рівняння переносу вологи

$$\frac{\partial q}{\partial t} + u\frac{\partial q}{\partial x} + v\frac{\partial q}{\partial y} + w\frac{\partial q}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}k\frac{\partial q}{\partial z}. \tag{1.85}$$

Рівняння балансу атмосферних домішок

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u\frac{\partial S}{\partial x} + v\frac{\partial S}{\partial y} + w\frac{\partial S}{\partial z} + \frac{\partial S w_a}{\partial z} = \varepsilon_a + \frac{\partial}{\partial z}k\frac{\partial S}{\partial z}. \tag{1.86}$$

Рівняння теплопровідності в ґрунті

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\lambda_s}{\rho_s c_s} + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2}. \qquad (1.87)$$

Тут і далі $u_g = -\frac{1}{l\rho}\frac{\partial p}{\partial y}$, $v_g = \frac{1}{l\rho}\frac{\partial p}{\partial x}$, - швидкості геострофічного вітру уздовж осей x и y, p — тиск, $l = 2\varpi \sin\varphi$ — параметр Кориолиса, φ — широта місця, ϖ =0,729*10^{-4} с$^{-1}$ — кутова швидкість обертання Землі, $k=k_z$— коефіцієнт турбулентної в'язкості, зв'язаний з турбулентними пульсаціями по вертикалі, T — температура, і $\varepsilon_л$ — променистий приплив тепла до одиниці об'єму, c_p — питома теплоємність повітря при постійному тиску, q — питома вологість повітря, λ_s, ρ_s, c_s — коефіцієнти теплопровідності, щільності і теплоємність ґрунту відповідно.

У найпростішій постановці задачі значення коефіцієнта турбулентності k вважається заданим. Далі буде обговорюватися саме цей варіант. У більш складній постановці задачі для визначення коефіцієнта турбулентності вводяться додаткові рівняння.

Для визначення променистого припливу тепла $\varepsilon_л$ вводяться ще рівняння переносу променистої енергії. Після цього система рівнянь гідротермодинаміки мсзопроцесів стає замкнутою. Не розглядаючи тут цю частину задачі, будемо вважати далі величини $\varepsilon_л$ відомими. З обліком сказаного система семи рівнянь (1.81)—(1.87), що містить сім невідомих, є замкнутої. Для рішення цієї системи рівнянь необхідно поставити початкові і граничні умови. Як початкову умову приймемо, що в момент часу $t=0$ значення всіх семи шуканих перемінних усередині мезометеорологічного полігона, що включає в себе також шар ґрунту глибиною порядку d=20 см, є заданими.

Сформулюємо тепер граничні умови. Як уже говорилося, поза мезометеорологічним полігоном значення всіх шуканих перемінних визначаються на основі великомасштабної моделі. Це, зокрема, означає, що на висотах $z=h$ при рішенні поставленої задачі величини u, υ, ω, T, q і S відомі. У випадку, якщо великомасштабна прогностична модель не дозволяє розраховувати значення концентрації домішки, то як граничні умови для S приймаються умови виду (1.28), (1.29) і (1.30). Зокрема, звичайно приймається це поза метеорологічним полігоном s =0, що також означає, що

$$\text{при} \quad z=H \quad S=0. \qquad (1.88)$$

Найбільш складне питання про постановку граничної умови на земній поверхні. Для концентрації домішки приймається одна з умов (1.31), (1.32), (1.33) чи (1.34). Наприклад, умова (1.34) при z=0

$$k_z \frac{\partial s}{\partial z} - w_a s - \beta s = 0. \qquad (1.89)$$

Для інших перемінних приймається

$$\text{при} \quad z=0 \qquad u=v=w=0, \quad T=T_s, \quad q=q_o(T_s), \qquad (1.90)$$

$$(1-A)S+G-\delta\sigma T_s^4+\lambda(\frac{\partial T}{\partial z}+\gamma_a)-\lambda_s\frac{\partial T_s}{\partial z}-LQ-H_a=0, \qquad (1.91)$$

де $q_o(T_s)$ — задана функція, A — альбедо поверхні, що підстилає, S і G - спадні потоки короткохвильової (сонячної) і довгохвильової радіації $\lambda = kc_p\rho$ та λ_s - коефіцієнти теплопровідності повітря і ґрунту (води); γ_a, - сухоадиабатичний градієнт температури повітря; σ - постійна Стефана-Больцмана $\delta \approx 1$ - відносна випромінювальна здатність (коефіцієнт «сірості») поверхні, що підстилає, L - теплота конденсації чи випару, H_a — потік тепла від поверхні в атмосферу, обумовлений антропогенними факторами.

Співвідношення (1.91) — рівняння теплового балансу підстилаючої поверхні, у ньому величини

$$N=-\lambda(\frac{\partial T}{\partial z}+\gamma_a), \qquad Q=-k\rho\frac{\partial q}{\partial z}, \qquad B=-\lambda_s\frac{\partial T_s}{\partial z} \qquad (1.92)$$

являють собою потоки тепла і вологи між підстілаючою поверхнею і повітрям, і потік тепла між підстилаючою поверхнею і глибинними шарами ґрунту (води) (вони вважаються позитивними при їхньому напрямку нагору).

Система нелінійних диференціальних рівнянь (1.81)—(1.87) через надзвичайну складність не може бути вирішена аналітично. Тому вона вирішується чисельними методами. Згідно з цими методами, у розглянутій ділянці атмосфери і ґрунту вводиться просторова сітка крапок. Диференціальні рівняння і граничні умови апроксимуються кінцево-різницевими рівняннями, а початкові дані задаються у вузлах просторової сітки крапок. У такій сітці крок по горизонтальних координатах приймається близько 1—2 км, а по вертикальної — близько 100—300 м. Шляхом чисельного інтегрування кінцево-різницевих рівнянь за часом знаходяться значення всіх шуканих функцій у вузлах сітки в різні моменти часу.

Зміни метеорологічних елементів за часом, що розраховуються зазначеним шляхом, приводять до відповідної зміни концентрацій різних атмосферних домішок. Це випливає також і з аналізу рівняння балансу домішки. У свою чергу, зміни концентрації атмосферних домішок, особливо аерозолів, будуть приводити до зміни припливів тепла в атмосфері і до підстилаючої поверхні, що і приводить потім до зміни всіх метеорологічних елементів.

Більш повні теоретичні схеми для моделювання процесів забруднення великих міст і їхній вплив на термічний режим атмосфери були запропоновані Г. И. Марчуком, М. А. Атвотером і ін. У той же час існують і спрощені моделі. Одна з них була запропонована Н. С. Вельтищевой. У цій останній замість тривимірної розглянута одномірна модель, у якій збережені тільки вертикальні перемінні. Вона виходить з викладеної схеми, якщо прийняти в ній умову горизонтальної

однорідності, тобто покласти, що всі горизонтальні похідні звертаються в нуль.

На основі різних моделей були проведені численні чисельні експерименти для умов, що імітують умови великих міст. У результаті цих експериментів шляхом імітування різних джерел домішки й антропогенних потоків тепла, удалося установити, що в зоні великих міст виникає «острів тепла», температура повітря в який перевищує температуру навколишньої місцевості влітку на 4—6°, а узимку — на 1—2°. Удалося установити також істотну залежність просторово-часового розподілу забруднення атмосфери від рельєфу місцевості міста і від метеорологічних умов. На основі цих експериментів відшукуються «оптимальні» умови, для розміщення і продуктивності джерел забруднень.

1.10 Фізичні основи прогнозування забруднення повітря

Досягнутий рівень розвитку промисловості, транспорту, сільського господарства неминуче веде, в тій чи іншій мірі, до забруднення природних середовищ. Найважливіше завдання - захист повітряного басейну від забруднення чи відвернення (запобігання) росту концентрації у період несприятливих метеорологічних умов (НМУ). Воно будується на розгляді блоку метеорологічних факторів, оскільки процеси розсіяння та нагромадження забруднювальних речовин (ЗР) визначаються, в основному, термодинамічним станом атмосфери. Облік розсіюючої здатності атмосфери потрібен для раціонального нормування викидів промислових об’єктів та оптимального підбору параметрів викидів з метою зберігання чистоти повітряного басейну.

Програми робіт, які мають напрям на знижування рівня забруднення, в тому числі по встановленню гранично допустимих викидів (ГДВ), розраховані на кілька років. Однією з реальних можливостей поліпшення стану повітряного басейну вже у найближчий час є короткочасне зниження викидів та концентрацій домішок у час НМУ на основі короткотермінового прогнозу. Ми будемо займатися питаннями короткотермінового прогнозування та запобігання високого рівня забруднення (ВРЗ) атмосфери у час НМУ. Але приймати рішення щодо скорочення викидів промислових об’єктів можливо лише на основі надійного прогнозу забруднення атмосфери (ЗА). В останні роки у нас та за кордоном велику увагу приділяють короткотерміновим прогнозам забруднення повітря (ЗП) та відверненню ВРЗ у приземному шарі атмосфери у час НМУ. В більшості випадків, викиди здійснюються за рахунок старих виробництв без очищення вихідних газів. Під час НМУ не повинно бути “залпових викидів”. У різних регіонах умови розсіювання різні, виходить, при тій самій потужності виробництва викиди можуть утворювати різні концентрації.

Важливо відзначити, що роботи по прогнозу ЗП та регулюванню викидів не втратять свого значення і тоді, коли проблема забезпечення чистоти повітряного басейну (ПБ) буде, в основному, вирішена. Зараз, в основному, завершені роботи на підприємствах у досягненні ГДВ, яким відповідають ГДК у приземному шарі повітря. Але ГДВ забезпечують ГДК при порівняно часто зустрічаючихся нормальних НМУ. У деяких випадках аномальних НМУ, коли концентрація суттєво перевищує норму, ГДК повинна досягатися за рахунок завчасного прогнозування та запобігання можливого росту ЗА. Сказане має відношення і до проектування нових підприємств. Важко передбачити настільки малий викид шкідливих речовин (ШР) в атмосфері та такі високі труби, щоб ні при яких умовах приземні концентрації не перевищували ГДК. Тому на стадії проекту припускається досягнення норми чистоти атмосфери при нормальних НМУ, а у час аномальних НМУ - тимчасове скорочення викидів відповідно з прогнозом забруднення. Такий підхід дає великий економічний ефект. У наступний час прогнозування необхідно практично у всіх містах. Там, де рівень забруднення (РЗ) великий, завдяки заходам, які приймаються у час НМУ, запобігається ВРЗА. Там де РЗ невеликий і тільки іноді концентрації перевищують ГДК, є можливості повного дотримання гігієнічних норм чистоти атмосфери в наслідок знижування викидів під час НМУ. Таким чином, роботи по захисту атмосфери під час НМУ – це важлива складова частина комплексу заходів по забезпеченню чистоти повітряного басейну.

Цілий ряд катастрофічно високих РЗА, що привели до людських жертв у Токіо, Лос-Анджелесі, Лондоні, Нью-Йорку можна було запобігти, якби провели прогноз ЗП. Вперше прогноз ЗП був складений у США, де з 1955р. почали проводити досвідне, а потім і оперативне прогнозування. При складанні прогнозів апріорі приймали, що ВРЗА має зв’язок з застійними явищами (слабкий перенос та термічна стійкість нижнього шару атмосфери), а також з відсутністю опадів. Але не тільки ці НМУ можуть сприяти формуванню ВРЗА.

Простий приклад прогнозу (Боутгер та Сміт [9]). Було допущено, що рівень забруднення атмосфери залежить тільки від поєднання швидкості повітря у землі “U” та різниці температури на рівні землі та висоти H=1км. Найбільше забруднення повітря при $\Delta T<0^{o}$C, $U\leq7$ вузлів (3.5м/с) найменше ЗП при $\Delta T>0^{o}$C, $U>7$ вузлів. Але і при невеликому повітрі 5-7 м/с та нестійкій стратифікації може бути високий рівень забруднення (вклад високих джерел). Існує суперечність, що при $\Delta T>0^{o}$C та $U<7$ вузлів може спостерігатися слабке ЗП.

На території США щоденно виділяють зони можливого формування умов застою повітря. Існують прогнози, які основані на обліку висоти шару змішування (параметру, який враховує стійкість атмосфери). Висота шару змішування визначається на аерологічній діаграмі окремо для ранкового і денного строків. Верхня межа висоти шару змішування

знаходиться на рівні схрещення сухої адіабати та кривої стратифікації. Суху адіабату проводять з точки фактичної температури (t^0) з додаванням 3-5^0 (для обліку “острова тепла”).

У роботі Міллера робиться догадка, що на утримання домішок у міському повітрі мають вплив нижчий (0-1 км) та верхній (1-6 км) шари атмосфери. Вплив кожного шару оцінює показник, одержаний при множенні середнього значення атмосферної стійкості, термічного становища повітряної маси, інерції процесів. Метод не дозволяє прогнозувати високий рівень забруднення атмосфери, який не має зв’язку з умовами застою.

Ці прогнози відносяться до синоптико-статистичних і мають зв’язок з емпірико-статистичним аналізом розповсюдження шкідливих речовин і використанням для цієї мети інтерполяційних моделей гаусового типу.

Більш універсальні чисельні прогнози, які базуються на розробці теорії атмосферної дифузії, тобто на основі математичного опису розповсюдження домішок за допомогою рішення рівняння турбулентної дифузії.

Статистичні прогнози найбільш прості – множинна лінійна, послідовно графічна регресія та інші широко використовують у різних країнах. Перегляд праць по цьому питанню свідчить що:

1) у якості **предиктанту** (показника, що прогнозується) у схемі прогнозу беруть усередненні по часу та простору характеристики ЗП, а не одиничні концентрації;

2) параметри, які описують процес переносу і розсіяння домішки (звичайно метеорологічні характеристики) – це **предиктори**;

3) доцільно створювати схеми прогнозу окремо по сезонах чи при заданих напрямках вітру.

При вивченні метеорологічних умов ЗП та його прогнозу користувалися результатами теоретичних та експериментальних досліджень, які проводились у відділі досліджень повітряного басейну ГГО під керівництвом професора М. Є. Берлянда [1]. Їх важлива особливість - облік метеорологічних умов (МУ) у значному шарі атмосфери. Оскільки сучасні могутні джерела (ТЕС) мають висоту труб більш ніж 150-250 м, перегріті викиди та початковий імпульс, ефективна висота труби за рахунок цього збільшується. При визначених умовах газоповітряна суміш досягає висоти $H \geq 1$км, як і шапка диму від усього міста. Масштаб забруднення атмосфери поодинокого джерела зближується до масштабу забруднення повітряного басейну міста. Таким чином, закономірності розповсюдження домішок в атмосфері від поодинокого джерела можна перенести на процес забруднення повітря по місту в цілому.

Прогнозування ЗП від поодинокого джерела зводиться до завбачення виявлених для конкретного джерела небезпечних умов погоди і до розрахунку концентрацій, які утворюються при цьому у приземному шарі.

1.11 Чисельний прогноз концентрації шкідливої домішки по дифузійній моделі

Основні закономірності розповсюдження домішок у атмосфері

У роботах, що виконані в ГГО під керівництвом професора М.Є. Берлянда [1, 2, 4], вивчені особливості розповсюдження домішок від джерел в залежності від параметрів викидів і МУ. Рішення цього завдання проводилось на основі інтегрування рівняння турбулентної дифузії:

$$u\frac{\partial S}{\partial x} - \omega_a \frac{\partial S}{\partial z} = k_y \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial S}{\partial z} - \varepsilon_a , \qquad (1.93)$$

де S - концентрація домішки у приземному шарі повітря;

u - швидкість вітру;

ω_a - швидкість осідання домішки;

k_z, k_y - вертикальна та горизонтальна складові коефіцієнту турбулентного обміну. Вісь X спрямована в напрямку вітру, вісь $У$ - перпендикулярно вітру, вісь Z - вертикально догори;

ε_a - приток та стік домішки за рахунок внутрішніх причин.

Рівняння має рішення при межових умовах, згідно з якими джерело домішки потужністю M зосереджені у точці $X=У=0$ на висоті Z.

Приймається, що на підстилаючий поверхні (при $Z=0$) турбулентний потік домішки відсутній, а на великій відстані ($X, У, Z \to \infty$), $S \to 0$.

Для легких домішок газів та мілко дисперсного пилу приймалось $\omega_a = 0$, а для пилу, який має тенденцію до осідання: $\omega_a > 0$. Швидкість вітру змінюється з висотою по логарифмічному закону, а вертикальна складова коефіцієнту турбулентного обміну k_z лінійно росте з Z до висоти приземного шару повітря, а вище - $k_z = const$. При аномальних умовах (інверсійні шари) ураховується різке зменшення k_z у зоні інверсії. Вивчались аномальні випадки відхилення вертикального профілю вітру від логарифмічного у штильових шарах. Горизонтальна складова k_y покладається пропорційній швидкості вітру. Враховується також, що початкова швидкість підіймання димових газів та їх перегрів приводить до зросту ефективної висоти джерела викиду домішки.

Прогноз максимальної концентрації по дифузійній моделі.

Після інтегрування рівняння турбулентної дифузії в ГГО отримали висновки про особливості розповсюдження домішок від джерела з гарячими та холодними викидами (Т≈0). У холодних викидах підіймання здійснюється тільки за рахунок початкової швидкості викиду.

Інтегрування дозволило отримати максимальну концентрацію S_m, яка утворюється при несприятливих метеорологічних умовах (НМУ), які часто зустрічаються. При $\frac{\partial S}{\partial x} = \frac{\partial S}{\partial y} = 0$ знаходимо S_m та x_m. Ці висновки увійшли до ОНД-86, у якому наведені формули для розрахунків

максимальних концентрацій у приземному 2-метровому шарі повітря у період НМУ та формули відстань, на яких відбуваються ці концентрації.

При наявності N однакових і близько розміщених гарячих джерел для міських викидів максимальна концентрація дорівнює

$$S_m = \frac{AMFmn\eta}{H^2}\sqrt[3]{\frac{N}{\Delta TV}} \quad , \qquad (1.94)$$

де A – коефіцієнт, який враховує розсіювальну здібність атмосфери (несприятливі умови вертикального та горизонтального перемішування). Змінюється від 140 до 250 та розраховується

$$A = \hat{a}\frac{k_1}{u_1 u_0},$$

u – швидкість повітря, u_1=2м/с,

$\hat{a}$ – в деякій залежності від шорсткості підстилаючої поверхні Z і від висоти приземного шару n. Середня шорсткість відображена у $\hat{a}$=0.3,

φ_0 – дисперсія за період T, відхилення середніх напрямків вітру на кут φ.

Для холодних викидів:

$$S_m = \frac{AMFmn\,\eta}{H\sqrt[3]{H}} \cdot \frac{DN}{8V} \quad , \qquad (1.95)$$

M – кількість викинутої речовини (г/с);

H – геометрична висота труби (м);

V – обсяг (витрата) димових газів, які виходять з N труб (м^3/с) ;

$$\Delta T = T_г - T_п, \qquad (1.96)$$

$T_г$ – температура димових газів;

$T_п$ – температура повітря (^{0}C);

D – діаметр устя (м);

η - коефіцієнт, що враховує вплив рельєфу на концентрацію домішки;

F, m, n – безрозмірні коефіцієнти, що пов'язані з особливостями викидів;

F - враховує дисперсний склад пилу та ступень очищення викидів (газ F=1; F=2 – якщо ККД пристроїв, що уловлюють пил, >90%, F=2.5 – при ККД = 75-90, F=3 – при ККД<75%);

m залежить від $f = 10^3\frac{\omega_0^2 D}{H^2\Delta T}$; $\quad m = \frac{1}{0.67 + 0.1\sqrt{f} + 0.34\sqrt[3]{f}}$; (1.97)

n залежить від $\upsilon_M = 0.65\sqrt[3]{\frac{V\Delta N}{H}} - гор.$; $\begin{cases} n = 1; \upsilon_M \geq 2 \\ n = 0.532; \upsilon_M - 2.13\upsilon_M + 3.13; \\ n = 4.4\upsilon_M; \upsilon_M < 0.5 \end{cases}$ (1.98)

$$\upsilon_M = 1.3\frac{\omega_0 D}{H} - хол. \qquad (1.99)$$

Аналіз формул (1.94) та (1.95) дозволяє зробити висновок:

1) Забруднення повітря у районі джерел зменшується зі збільшенням висоти викидів Н. Для гарячих викидів даний ефект більше, ніж для холодних ($\frac{1}{H^2}$ та $\frac{1}{H^{4/3}}$).

2) Концентрація домішок зменшується з скороченням кількості викидів речовини *M*. При цьому очищення однаково ефективно як для холодних, так і для гарячих викидів ($S_m \sim M$).

3) Забруднення повітря при централізації викидів, тобто при зменшенні числа труб *N*. Цей ефект збільшується для джерел з холодними викидами ($S_m \sim N$), ніж для гарячих ($S_m \sim \sqrt[3]{N}$).

4) При заданій кількості джерел (труб) їх максимальне розповсюдження визначає найменші приземні концентрації домішок в повітрі внаслідок зменшення ефекту накладення викидів.

5) Концентрація ШР у приземному шарі атмосфери зменшується з збільшенням *V*, тобто зі збільшенням ω_0, оскільки

$$V = \frac{\pi D^2}{4}\omega_0 . \qquad (1.100)$$

Для холодних викидів цей ефект більше, ніж для перегрітих.

6) Концентрація ШР зменшується зі збільшенням температури газів, які виходять (для гарячих джерел), тобто зі збільшенням ΔT.

Для холодних – великий вплив має температура повітря.

Приземна концентрація *S* має максимальне значення на деякій відстані x_m по напрямку вітру (уздовж осі X)

$$x_m = \frac{5-F}{4} dH . \qquad (1.101)$$

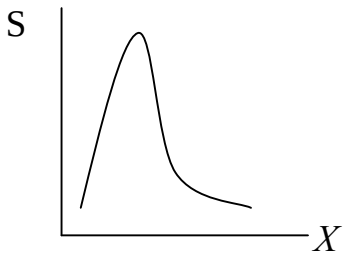


Рис. 1.2 – Вигляд розповсюдження приземної концентрації домішки по осі X

D залежить в основному від υ_M, *d* маленьке при слабких вітрах внаслідок цього x_m мало. Для твердих важких домішок F збільшується, внаслідок цього x_m менш, ніж для легких.

Для гарячих викидів $d \approx 20$ внаслідок цього відзначається на відстані 20*H* від джерела.

Для холодних викидів $x_m \rightarrow$5-10 Н.

Зміна “S” по осі факелу та поперек.

$S=S_1S_m$ – по осі факелу концентрація визначається коефіцієнтами S_1

$$S_1=f(x/x_m) \quad . \qquad (1.102)$$

Концентрація шкідливих речовин з усуненням від джерела з початку швидко збільшується, особливо при x/x_m (для гарячих джерел цей діапазон 10-40*H*). На відстані 10-15 км від крупних джерел залишається $S\approx0.3$. Це важливо при накладенні факелу від великої кількості джерел. Для низьких джерел S_1=1від джерела до x_m.

Для низьких джерел (H<10м) зменшується мінімум концентрації поблизу джерела, а при H=2м зовсім зникає.

Таким чином, могутні промислові об’єкти можуть утворювати великі області з підвищеними концентраціями ШР у приземному повітрі. Суперпозиція цих областей від багатьох джерел визначає поле концентрації у місті. Облік концентрації домішок, утворених окремими джерелами дозволяє оцінити вклад кожного джерела у формування РЗА.

1.12 Прогноз концентрації шкідливої домішки по гаусовій моделі

Для опису розповсюдження домішок в АП, наряду з рішенням рівняння турбулентної дифузії, широко використовуються формули гаусового розподілу концентрацій, які отримані на статистичній основі. Одна з перших робіт у цьому плані належить Сетону (1958 р), який поклав, що у загальному випадку концентрація домішки *S* у точці *(X,У,Z)* від джерела, який знаходиться з початку координат, пропорційна множенню

$$P_y = \frac{1}{\sigma_y\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2\sigma_y^2} \qquad (1.103)$$

на аналогічні функції P_z та P_x, які відносяться до координат *Z* та *X,* тобто

$$S \approx P_x \cdot P_y \cdot P_z \, . \qquad (1.104)$$

Тут σ_y^2 - дисперсія розподілу домішки у напрямку Y. Сетон завдал визначений вид лагранжової кореляційної функції для концентрацій, потім використав теорему Тейлора про зв’язок цієї функції з σ_i та отримав

$$\sigma_i = \frac{1}{2} C_i^2 (\bar{u}t)^{2-n}, \qquad (1.105)$$

де C_i - деякі коефіцієнти (i=1,2,3 відповідають X, Y, Z), $\bar{u}$ - середня по висоті швидкість вітру. У випадку миттєвого джерела *t* - час після початку дії джерела, а для безперервно діючого джерела покладається, що $t = \frac{X}{\bar{u}}$.

Сетон показав також, що при відібраному ним вигляді кореляційній функції повинен виконуватись ступеневий закон для зміни швидкості вітру з висотою, де покажчик ступені пов'язано з *n* у $u=u_1Z^n$. Внаслідок цього параметр *n*, необхідний для розрахунку концентрації можна визначити по вертикальному профілю швидкості вітру і цім посередньо облікувати умови стратифікації.

Спочатку Сетон отримав формулу для випадку окремих джерел, яка потім підтвердилась результатами спостережень у Портоні (Англія) при рівноважних умовах до невеликих відстань (кілька сот метрів). Потім ця формула була використана без достатнього обґрунтування і для випадків високих джерел.

Для вивчення закономірностей розповсюдження домішки, перевірки та уточнення формул для розрахунку атмосферної дифузії, визначення в них метеорологічних параметрів широко ведуться експериментальні роботи в США, Англії, Швеції. Більшість цих досліджень високо технічно обладнанні, довгочасні та містять велику кількість трудомістких та багатокоштовних спостережень з наземними та високими джерелами квазіміттєвої та безперервної дії.

1) По проекту "Грин Глоу" у штаті Вашингтон (США) утворювалися наземні джерела сірчаного цинку. Вибір проб здійснювався у 833 точках, які знаходилися на концентричних дугах навколо джерела, на перших чотирьох дугах установлювали по п'ять щоглів висотою до 60м.

2) Національна лабораторія у Нью-Йорку проводила періодичні спостереження з користуванням 130-метрової щогли більш 15 років.

3) Крупні експерименти проводились у США з користуванням патронів пластикових балонів постійного рівня (назва їх складена з початку та кінця слів - тетраїдні балони). Тетрони підкоряються рухам повітря и грають роль трасера і дозволяють по спостереженням за їх траєкторією судити о інтенсивності турбулентного розсіяння.

В працях Сетона та інших на основі емпірикостатистичних міркувань часто приймається, що наземна концентрація домішки виражається формулою

$$S = \frac{M}{\pi \sigma_y \sigma_z u} \cdot e^{-\frac{H^2}{2\sigma_z^2} - \frac{Y^2}{2\sigma_y^2}} \qquad (1.106)$$

Швидкість вітру та інших факторів звичайно визначають у відповідності з класами стійкості приземного шару по Песквілу. На основі цієї класифікації Гифорд побудував спеціальний графік для визначення горизонтальної (σ_y) та вертикальної (σ_z) дисперсії.

Існують формули Брігса для випадка ровної відкритой місцевості и відстань *X* от 100 м до 10 км

$$\sigma_y = \frac{\alpha_y X}{\sqrt{1 + 10^{-4} X}}; \qquad \sigma_z = \frac{\alpha_z X}{\breve{s}_z(X)}. \qquad (1.107)$$

Коефіцієнти α_y, α_z і функція $\breve{s}_z$ затабульовані для 6 класів стійкості.

У деяких роботах приймається

$$\sigma_y = a_1 X^{\alpha_1}, \quad \sigma_z = b_1 X^{\beta_1} \tag{1.108}$$

де α_1, β_1 та a_1, b_1 - константи, які визначаються эмпірично. Вони отримані для відстань від 1 до 100 км та затабульовані.

Розшук екстремума з умови: $\frac{\partial \overline{S}_m}{\partial u} = 0$ обмежується залежністю концентрації тільки від швидкості вітру і не враховується, у відміні від робот ГГО, вплив стійкості атмосфери, чи точніше інтенсивності турбулентного обміну. Робота Регленда (1976 р.), з формули (1.106) для $S/z=0$ при $y=0$ і (1.108) для σ_z та σ_y з умови $\frac{\partial S_m}{\partial x} = 0$ визначається максимальна концентрація S_m на відстані x_m. Потім користуються виразом для початкового підіймання

$$\Delta H = \frac{B_0}{u},$$

де B_0 - деякий параметр, який залежить від характеристики викиду та стійкості атмосфери.

Далі, з рівняння $\frac{\partial S_m}{\partial x} = 0$ знаходять максимальну концентрацію

$$S_m = \frac{M \beta_1 e^{-\frac{\alpha_1+\beta_1}{2\beta_1}} H^{-\frac{\alpha_1}{\beta_1}}}{\pi a_1 b_1 \alpha_1 B_0 [\frac{\alpha_1(\alpha_1+\beta_1)}{a_1^2 b_1^2}] \frac{\alpha_1+\beta_1}{2\beta_1}} \tag{1.109}$$

та відстань, до якої вона має відношення,

$$x_m = [\frac{\beta_1(\alpha_1+\beta_1)}{a_1^2 b_1^2}]^{\frac{1}{2\beta_1}} H^{\frac{1}{\beta_1}} \tag{1.110}$$

та небезпечну швидкість вітру

$$u_m = \frac{\alpha_1}{\beta_1} \frac{B_0}{H} \quad , \tag{1.111}$$

де H - геометрична висота труби.

Оскільки, згідно Песквілу, найбільше значення S_m досягає при $\alpha_1 = \beta_1$. Тоді з (1.109) і (1.111)

$$S_m = \frac{0.058 b_1 M}{B_0 a_1 H}. \tag{1.112}$$

Для різних становищ стійкості Регленд отримав також (суттєво спрощив розрахунки по формулам (1.109-1.111)

$$\frac{S_m B_0}{M} = f H^{-J}; \qquad \frac{u_m B_0}{H} = J; \qquad x_m = \psi H^{\breve{p}} \tag{1.113}$$

Значення f, J, ψ та $\breve{p}$ затабульовані для різних висот труб та становищ стійкості [1].

1.13 Узагальнені показники забруднення повітря по місту в цілому

При вивченні забруднення повітря (ЗП) по місту в цілому в першу чергу розглядається складова поля концентрації, яка характеризує одночасні зміни концентрацій по всієї території міста. Ця складова утворюється за рахунок дії великої кількості однотипних джерел з низькими викидами в наслідок накладення та перемішування викидів від усіх джерел міста. При такому підході зменшується випадкова частина інформації, так як можливість випадкового збільшення концентрації різних шкідливих речовин (ШР) в один і той же час в різних частинах міста мала.

Таким чином, при одночасній зміні вмісту домішок в різних районах міста можливо говорити про правдиві одиничні випадки значного зменшення чи збільшення забруднення повітря.

Як узагальнені інтегральні показники ЗП по місту в цілому розглянемо слідуючи три.

1. Нормована (безрозмірна) концентрація домішки *Q*, яка усереднена по всьому місту та по всім строкам спостережень:

$$Q = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{S_i}{\overline{S}_{нас?}}, \qquad (1.114)$$

де S_i - середня за день концентрація в і-тому пункті,

$\overline{S}_{сезі}$ - середньосезонна концентрація в тому ж пункті,

N - число стаціонарних пунктів в місті.

Нормування на середньосезонну концентрацію дозволяє виключити вплив зміни загальної концентрації від року до року, що надає можливість використовувати для аналізу ряд спостережень за декілька років.

2. Коефіцієнти при членах розкладання на природні ортогональні функції (п.о.ф.). Концентрації домішок у повітрі, які вимірялися на стаціонарних постах у заданому місті, можна представити у вигляді функцій по простору і коефіцієнтів, які залежать тільки від часу:

$$S(x,t) - \overline{S}(x) = \sum_{i=1}^{N}\alpha_i(t)\varphi_i(x). \qquad (1.115)$$

У формулі:

S(x,t) – концентрація домішки, яка залежить від *x* і моменту спостереження *t*;

$\overline{S}(x)$- середня концентрація, яка залежить від *x*, за сезон або півріччя; розраховується за даними спостережень кожного року окремо;

$\varphi_i(x)$- система п.о.ф., які визначають за фактичними даними спостережень, вони є власними функціями (векторами) матриці коефіцієнтів коваріації між концентраціями домішок у різних точках міста;

$\alpha_i(t)$- коефіцієнти, що відповідають функціям, які залежать тільки від часу *t*;

N – кількість членів розкладання.

Кількість коефіцієнтів розкладання (як і кількість членів розкладання на п.о.ф.) дорівнює кількості стаціонарних постів, спостереження яких обробляються. Але найбільша кількість інформації про мінливість ЗП міститься у першому члені розкладання на п.о.ф., який описує одночасні коливання концентрацій по всьому місту. Коефіцієнт при 1-ому члені розкладення $\alpha_1(t)$ є узагальненим показником забруднення повітря у місті.

3. Ще один спосіб, який дозволяє охарактеризувати ЗП по місту в цілому. За матеріалами спостережень за тривалий інтервал часу (наприклад сезон) по кожному стаціонарному посту для кожної домішки, що вимірюється, відбирається певна кількість найбільш великих значень концентрації. Для віднесення даного вимірювання до випадків з великими концентраціями приймається: $\boldsymbol{S_i > aS_{сезі}}$, де S_i - будь-яка концентрація; $S_{сезі}$ - середня за сезон концентрація, розрахована окремо для кожного окремого поста, $a>1$.

Показником щоденного забруднення повітря (ЗП) по місту в цілому при цьому з'являється параметр *P*, який розраховується:

$$P = \frac{m}{n}, \qquad (1.116)$$

m - кількість спостережень на всіх постах у місті з $S_i > 1.5S_{сезі}$ на протязі однієї доби;

n - загальна кількість спостережень на цих постах, які були зроблені за цю добу. *P* змінюється від 0 до1.

Враховуючи можливі випадкові коливання концентрації, а також помилки вимірювань, можна вважати, що *P*, як частотна характеристика є найбільш приємною для аналізу метеорологічних умов забруднення повітря. Так, значний зріст концентрацій на одному з стаціонарних постів, викликаний випадковими причинами буде мало впливати на значення параметра *P*, проте може помітно збільшити середню по місту концентрацію домішки. А невипадкові епізоди одночасного збільшення вмісту ШР у різних частинах міста, які визначаються метеорологічними умовами, достатньо добре виявляються при розгляданні щоденних значень параметру *P*.

Криві часового ходу α_1 та *P* повторюють одне одного. Достатньо високі коефіцієнти кореляції між *P* для окремих домішок та середньої по місту концентрації *Q*.

1.14 Вплив мікрометеорологічних умов у місті на формування рівня забруднення атмосфери

Мікрометеорологічні умови (ММУ) у місті істотно впливають на характер РЗА і найчастіше сприяють росту концентрацій ЗР. Урахування ММУ необхідне при аналізі впливу метеофакторів на ЗА і при розробці методів прогнозу ЗА.

Установлено, що температура повітря в місті вище, ніж у заміських районах (середньорічна температура вище на 0,5-1,5^{0}С, а при штилі і низькому фоні температур – на 10^{0}С і більше). З «островом тепла» (ОТ) пов'язаний ряд ММУ в місті.

У середньому існує тенденція до утворення ОТ у центрі міста, але реально існують причини його зсуву до районів щільної забудови, які не завжди збігаються з центром. Відомо, що верхня границя ОТ знаходиться приблизно на 100 м від поверхні землі. Однак у Запоріжжі в денній час існує піднесений ОТ на висоті 100-200 м, зв'язаний з гарячими викидами і нагріванням домішок сонячною радіацією.

Формування ОТ визначає виникнення міської циркуляції від більш холодних окраїн до відносно теплої центральної частини. Поле вітрових потоків складне через перепад температури поверхні, що підстилає, а швидкість приблизно 1-2 м/с. Місцева циркуляція може бути помітна, коли загальний перенос малий.

Потік повітря в місті значно спотворюється будівлями. Відомо, що швидкість вітру в міських районах нижче, ніж в околицях, у середньому на 25-30%, а в місцях із щільною забудовою – у кілька разів. У той же час на деякій висоті (200-300 м) у міських районах відзначається згущення ліній потоку і посилення вітру в порівнянні з заміськими районами. Така система потоків приводить до збільшення концентрації за рахунок викидів високих джерел, оскільки при малих градієнтах тиску швидкість вітру на рівні викидів може наближатися до небезпечної, а біля землі вітер практично відсутній. Таким чином, створюється несприятлива ситуація, що характеризується штилем у нижньому шарі повітря і небезпечною швидкістю на висоті викидів. Поряд з цим зростає поривчастість вітру, турбулентний обмін і, отже, надходження домішок зверху до земної поверхні.

Підвищений турбулентний обмін у місті, у порівнянні з заміськими районами, виявлений американцями за допомогою трасерів до рівня, що перевищує висоту будинків у 2,5 разів.

У місті помітно змінюється не тільки швидкість, але і напрямок вітру (у середньому на 30^0 і більше). У деяких місцях напрямок вітру виявився навіть протилежним основному переносу. Але викиди, які здійснюються великими об'єктами з високих труб, не тільки переносяться загальним потоком, але й опускаються внаслідок збільшення турбулентного обміну. Складна міська циркуляція впливає на низькі викиди і дим, що доходить до рівня будинків. При цьому підсилюється перемішування різних викидів і вирівнювання поля концентрацій.

Найбільш значні зміни повітряного потоку відбуваються поблизу великих промислових об'єктів: над підприємством виникають висхідні потоки повітря, а в околицях – спадні.

У містах, розташованих у горах або на березі моря, на систему потоків накладається горно-долинна і брізова циркуляція. При розвитку горно-долинного вітру з міста в гори переноситься «шапка» забрудненого повітря (спочатку верхня частина, за нею нижня частина по типу теплого фронту). У багатьох випадках вплив міста підсилює місцеву циркуляцію повітря. Так, над містом денний бриз розвинутий сильніше, ніж за його межами. Виявляється повернення один раз винесеного з міста ЗР, унаслідок замкнутої брізової циркуляції.

Підвищення температури і збільшення турбулентного обміну приводить до руйнування в місті приземних і утворюванню піднесених інверсій.

Таким чином, коли за містом приземна інверсія, то в місті внизу, як правило, створюється шар у 100-300 м підвищеного обміну, а при дуже могутніх приземних інверсіях – товщина шару підвищеного обміну зменшується до 50-100 м. Під піднесеною інверсією розташовується основна частина міської шапки ЗР. При руйнуванні нижньої границі приземної інверсії в місті зростає надходження в приземний шар домішок від високих джерел і розсіювання низьких викидів.

Мікрометеорологічні умови в місті впливають на процес формування туманів. З одного боку, підвищене надходження в атмосферу вологи і ядер конденсації створює передумови до збільшення туманів у місті, у порівнянні з околицею. Але з іншого боку, утворювання міського ОТ, особливо під час застою повітря, тобто коли туман найбільш ймовірний, приводить до зниження відносної вологості в приземному шарі, а отже до розсіювання туману. Характер впливу міста на утворення туману залежить від того, який з факторів переважає. Звідси протиріччя в літературі по цьому питанню. У місті туман завжди менше, ніж за містом. Але в районі нафтохімічних виробництв повторюваність туманів вище.

Можна зробити висновок, що небезпека формування високих концентрацій ЗР у приземному шарі повітря викидами поодиноких, великих джерел звичайно зростає внаслідок ММУ міста:

а) підвищена повторюваність піднесених інверсій приводить до збільшення частоти утворення високих концентрацій домішок у повітрі;

б) посилення турбулентного обміну внаслідок значної шорсткості поверхні, що підстилає, а також руйнування нижньої частини інверсії сприяють збільшенню надходження викидів зверху в приземний шар повітря;

в) сполучення підвищеної повторюваності штилів у землі і швидкості вітру, близької до небезпечної, на рівні 100-200 м (особливо в районах із щільною забудовою) зростає імовірність виникнення несприятливої ситуації.

Особливості ММУ в місті, що приводять до підвищення концентрації в приземному шарі, збільшують і процес перемішування домішок і утворюють фонову концентрацію. Утворення фонових і локальних концентрацій та їхньої зміни під впливом метеорологічних умов - процеси різних масштабів. Локальна концентрація визначається ММУ міста, а фонова – загальною метеорологічною і синоптичною обстановкою, тобто умов не залежних від самого міста.

1.15 Вплив синоптичних умов на забруднення атмосфери

Відомо, що залежності між вмістом домішок у міському повітрі та метеорологічними параметрами складні і неоднозначні. Вони визначаються комплексом параметрів. Між тим синоптична ситуація являє собою складний комплекс метеорологічних та аерологічних характеристик, відображує різноманіття процесів, які відбуваються в атмосфері.

Синоптичні ситуації успішно прогнозуються існуючими методами. Але фізична оцінка ситуацій та зв’язаних з ними забруднень складна внаслідок великої мінливості, а іноді нечиткої виразності синоптичної ситуації. Іноді при схожих синоптичних ситуаціях можуть спостерігатися різноманітні погодні умови, які визначають РЗА. Тому зупинимось на більш характерних.

Підвищене ЗА відмічається в антициклонах як в тепле, так і в холодне півріччя (в холодне більше). При циклонічній ситуації міське повітря більш-менш чисте, що пов’язане з опадами та посиленням вітру.

При наявності прогнозу позитивних аномалій тиску на місяць існує імовірність підвищення РЗА. Але фактичні матеріали показують, що антициклон не завжди визначає великий вміст домішок у міському повітрі. Найбільший РЗ у приземному шарі атмосфери відмічається у стаціонарному антициклоні та малорухомих гребнях, які являються високими і теплими барічними утвореннями. До останніх були віднесені антициклони та гребні, які рухаються зі швидкістю менш ніж 30 км за годину.

Ефект ВРЗА в стаціонарних антициклонах взимку більший, ніж влітку (для пилу більший, ніж для діоксиду сірки). Чим вищій середній РЗА, тим більше перевищення цього рівня в стаціонарних антициклонах.

Антициклони та гребні, що швидко рухаються, не визначають ВРЗА. Забруднення повітря у місті знижується при проходженні холодних фронтів, за винятком концентрацій, які утворюються високими джерелами з гарячими викидами.

Максимальний ВРЗА в малорухомих антициклонах, яким відповідає область тепла в тропосфері. Холодні антициклони рухаються швидко. Наряду з цим РЗА в антициклонах визначається приземною температурою повітря. Чим вище температура, тим ЗП повинно бути вище. Отже РЗА вищій в теплих частинах антициклонах, зазвичай у північній та західній периферії антициклону. Зазвичай це отрог сибірського антициклону.

Підвищене ЗП може відмічатися у малоградієнтних баричних полях особливо в районах баричної сідловини і в розмитих циклонах. Іноді в теплих секторах циклонів. Є відомості про підвищенні концентрації домішок в зоні теплих фронтів. Ріст концентрацій двооксиду сірки та двооксиду азоту відмічається при проходженні фронту, який пов'язаний з морським брізом, що визначається утворюванням низько розташованої піднесеної інверсії в денний час.

В проміжних полях при інших рівних умовах з антициклонічним вигином ізобар зв'язане більш високе ЗП, а з циклонічним вигином - менш високе ЗП, ніж з прямолінійними ізобарами.

Таким чином, утворенню підвищенного РЗА у міському повітрі сприяють: безградієнтне поле; антициклонічна крива ізобар; тепла повітряна маса; адвекція тепла в тропосфері.

У конкретних містах, в залежності від регіону, характеру синоптичних процесів, властивостей викидів, розташування джерел та інших факторів, мають бути виявлені інші особливості впливу синоптичних умов на ЗП.

1.16 Прогноз метеорологічних умов забруднення атмосфери

Методика прогнозу метеорологічних умов забруднення (МУЗ) розроблена у Гідрометеоцентрі СРСР у 1984 р. Методика базується на використанні фактичного і прогностичного аеросиноптичного матеріалу, який є у розпорядженні синоптика на момент складення прогнозів погоди загального користування. Вона дозволяє оцінити підготовленість стану атмосфери до процесу накопичення чи розсіювання шкідливих домішок. Обов'язковою умовою при роботі з цією методикою є використання фактичної та прогностичної карт AT_{925} (приблизно 750 м над поверхнею землі).

Метеорологічні умови забруднення у першому наближенні подають у вигляді комплексного показника:

$$МУЗ = Ц + H_{тд} + \overline{C}_{пер}\ , \qquad (1.117)$$

де $Ц$ – циркуляційний фактор у вигляді типу синоптичної ситуації; визначається по прогностичним (фактичним) приземним картам;

$H_{тд}$ – товщина шару перемішування, яка обумовлена термічною та динамічною турбулентністю, визначається за прогностичними (фактичними) кривими стратифікації температури;

$\overline{\text{Э}}_{пер}$ – середня швидкість вітру у шарі $H_{тд}$; визначається за прогностичними (фактичними) картами $АТ_{925}$ та $АТ_{850}$ та за приземною картою погоди.

При висоті шару перемішування $H_{тд}$ =0 (приземна інверсія)

$$МУЗ = Ц + H_{тд} + C_o, \qquad (1.118)$$

де C_0 – швидкість вітру біля поверхні Землі при $H_{тд} = 0$; визначається за прогностичною або фактичною картою поля приземного тиску.

Кількість предикторів, що входять у (1.117), може бути і більшою (4 або 5).

Якщо метеорологічним предикторам умовно задавати дискретні значення від 3 до 10, тоді комплексний показник МУЗ буде змінюватися від 9 до 30. При використанні чотирьох (п’яти) параметрів МУЗ приймає значення відповідно: від 12 (15) до 40 (50). Чисельні характеристики кожного предиктора беруться відповідно до таблиці 1.1. З таблиці виходить, що чим менша товщина шару перемішування і чим слабкіший вітер, тим більший внесок їх у забруднення атмосфери. Менші цифри надані і тим типам синоптичних ситуацій, при яких визначалась найбільша повторюваність випадків високого забруднення. Чим менші значення МУЗ, тим більш сприятливі умови для забруднення.

Послідовність розстановки предикторів в таблицях, аналогічних табл.1.1, в різних районах території України може відрізнятися від наведених.

Чисельні характеристики кожного спрогнозованого метеопараметра підставляються у формулу (1.117) або (1.118) за якими обчислюється комплексний показник. Для центрального європейського району метеоумови високого забруднення характеризуються його значеннями для ночі 9-13, для дня 9-16. При остаточному висновку про небезпечність метеоумов здебільшого враховується і тривалість збереження цих умов. Виняток можуть складати “застійні” ситуації, які представлені типами 3 і 4

у табл.1.1. Проте, для будь-якого міста такий висновок повинен бути підсилений статистичними даними.

Таблиця 1.1 - Значення Ц, $Н_{тд}$, $\overline{C}_{пер}(C_o)$ і відповідні їм чисельні характеристики (на прикладі трьох предикторів)

Типи синоптичних ситуацій	Стан атмосфери			Цисельна характ-ка
	$Н_{тд}$		$\overline{C}_{пер}$	
	м	гПа (мб)	(C_0) м/с	
Малорухомі антициклони та гребні, особливо які змістилися з півдня (тривалість ≥1,5 доби), Zn або депресія влітку	≤300	≤30	0-3	3
Розмиті поля (малоградієнтне поле підвищеного тиску) з вітром змінних напрямків (тривалість ≥1 доби)-підвищений рівень забруднення у теплий та холодний період	400	40	4	4
ПдЗ периферія Az_n – підвищений рівень забруднення у холодний період. 1.Західна периферія антициклону (незалежно від швидкості вітру) при траєкторії із південно-східного сектору і адвекції тепла. 2. Розмиті поля (тривалість <1 доби.)	 500 500	 50 50	 5 5	 5 5
1.Передня частина циклону (западини) при траєкторіях із південно-східного сектору та адвекції тепла (теплий сектор циклона) підвищений рівень забруднення у теплий та холодний періоди. 2. Малорухомий невеликий за площею циклон, в якому циркулює одна і та повітряна маса	600 600	60 60	6 6	6 6
Периферія баричних утворень, тривалість ≥1,5 доби і вітер ≤4м/с (встановлюється ПдЗ периферія Az_n на ≥1,5 доби при слабкому вітрі).	700	70	7	7
Центри або периферії баричних утворень тривалість ≤1,5 доби і вітрі ≤ 4м/с	800	80	8	8
Центри або периферії баричних утворень будь-якої тривалості і вітрі ≥5м/с.ПдЗ периферія Az_n, яка руйнується.	900	90	9	9
1.Баричні утворення, які швидко рухаються, або перемежування западин та гребнів (хвильова діяльність), проходження фронтів Zn 2. Ультраполярне вторгнення повітряної маси	≥1000	≥100	≥10	10

Термінологія і оцінка виправдовуваності прогнозів МУЗ. Числовий вираз комплексного показника МУЗ є основою для відповідної термінології прогнозу у формулюванні, зрозумілому споживачам. Умови, за яких вживається одна з трьох формулювань прогнозу, наведені в табл.1.2.

Таблиця 1.2 - Термінологія прогнозів за комплексним показником ***МУЗ*** без урахування вагових коефіцієнтів окремих предикторів

Термінологія прогнозів	Умови за яких надається формулювання прогнозу
Очікуються метеоумови високого забруднення – МУВЗ	На строк прогнозу і в попередні 12 та 24* години одержані значення МУЗ: на ніч 9-13: на день 9-16.
Очікуються метеоумови накопичення шкідливих домішок (короткочасні МУВЗ) – $МУВЗ_{кр}$	На строк прогнозу і в попередні 12 годин одержані значення МУЗ: на ніч 9-13: на день 9-16.
Метеоумови високого забруднення не очікуються – $МУВЗ_{н/о}$	І.На строк прогнозу одержані МУЗ: для ночі (дня) дорівнюють та більші 14 (17)

*При застійних ситуаціях (тип 3 та 4 табл. 1.1) урахування тривалості МУЗ у ряді міст може бути необов’язковим.

При оцінюванні прогнозів МУЗ використовується три градації виправдовування: 100%, 50% та 0% (табл.1.3). Попередження випадків метеоумов високого забруднення (МУВЗ) розраховується за цією ж таблицею, але з урахуванням фактично спостережених випадків МУВЗ.

Таблиця 1.3 - Оцінка виправдовуваності прогнозів МУЗ

Текст прогнозу	Виправдовуваність (%) прогнозів МУЗ		
	100	50	0
1.Очікуютьсяметеоумови високого забруднення	МУВЗ	$МУВЗ_{кр}$	МУВЗ не було
2.Очікуються метеоумови накопичення шкідливих домішок (короткочасні МУВЗ)	$МУВЗ_{кр}$	МУВЗ	МУВЗ не було
3.Метеоумови високого забруднення не очікуються	МУВЗ не було	$МУВЗ_{кр}$	МУВЗ

Для оцінки прогнозів використовується діагностичний аеросиноптичний матеріал, по якому, використовуючи формули (1-4), також визначається комплексний показник МУЗ. Цей показник зіставляється потім з його прогностичним значенням.

Взаємодія гідрометеоцентрів з виконкомами обладміністрацій. Порядок взаємодії гідрометеоцентрів з виконкомами обладміністрацій визначається Положенням, яке затверджується з обох сторін.

Гідрометцентр на підставі методики, яка була коротко викладена раніше, оцінює підготовленість атмосфери до накопичення чи розсіювання шкідливих домішок і робить висновок про небезпечність метеорологічних умов, який разом з необхідними метеорологічними параметрами передається до облвиконкому.

У виконкомі на основі висновку гідрометеоцентру та прогностичних схем, які розроблені за іншими методиками для міста, а також даних про фактичне забруднення атмосфери, прогнозуються рівні ЗА по місту у цілому та від окремих джерел.

У випадку якщо фонове ЗА близьке до критичних значень та очікуються метеоумови високого забруднення, на підприємства передаються попередження з метою прийняття заходів щодо зменшення викидів шкідливих домішок.

Моніторингова служба в ці періоди здійснює контроль за проведенням підприємствами необхідних заходів.

1.17 Прогнозування забруднення повітря методом лінійного регресійного аналізу

Якщо існує лінійний зв'язок між окремими предикторами та предиктантом, при будівництві прогностичної моделі використовують метод лінійного регресійного аналізу. Виправдовуваність прогнозів по даному методу може скласти для деяких міст 93% на залежному матеріалі і 80% - на незалежному. Суть методу складається в знаходженні предикторів, які мають з предиктантом найбільш значний кореляційний зв'язок. Потім частіше усього методом найменших квадратів (МНК) розраховують коефіцієнти регресії і будують лінійне регресійне рівняння.

Регресійну прогнозтичну модель частіше усього будують методом покрокової регресії.

Метод покрокової регресії. Вивчення процесів, які ідуть в атмосфері та обумовлюють переніс і дифузію домішок у граничному шарі, дає можливість визначити фактори, які можуть бути предикторами в статистичних прогностичних моделях. Початкове число цих факторів або потенціальних предикторів, може бути достатньо великими. Проте остання обставина не поліпшує розраховану схему, оскільки збільшує дисперсію

помилок. Це пов'язано з тім, що матриця кореляції, на якій заснована система нормальних рівнянь знаходиться емпірично з використанням експериментальних даних, які утримують помилку вимірювань. Незалежні предиктори не вносять суттєвої помилки в параметри моделі, так як у цьому випадку матриця кореляції добре обумовлена. Проте в зв'язку з тім, що серед великої кількості потенціальних предикторів є велике число статистично зв'язаних один з одним, матриця кореляції предикторів виявляється погано обумовленою. У цьому випадку помилки вимірювань, які утримуються у вихідних даних, суттєво впливають на правдивість оцінок параметрів моделі, а отже, і на адекватність моделі процесу. Таким чином, при будівництві прогностичних схем по методу лінійної регресії необхідна наявність лінійного зв’язку хоч би з одним метеорологічним параметром.

Виникає задача відбору з складу потенційних предикторів таких, які би досить повно відбивали вплив процесів, які ідуть у граничному шарі атмосфери, на розсіяння шкідливих домішок.

Процедура, яка дозволяє вибрати оптимальний склад статистично зв'язаних предикторів, прийнято називати просіюванням предикторів. Існує декілька методів. Самий поширений з їх – метод покрокової регресії (МПР). Наведемо скорочений алгоритм МПР.

Складається матриця $\tilde{X}(n \times m)$ вихідних даних розміром $n \times m$, де m – кількість предикторів плюс предиктант, n – кількість рядків або векторів предикторів. Розраховується середнє значення кожного стовпчика матриці $\tilde{X}$:

$$\overline{\tilde{X}_i} = \frac{1}{n}\sum_{L=1}^{n} \tilde{X}_{iL}\,; \qquad i = \overline{1,m} \qquad L = \overline{1,n} \quad . \tag{1.119}$$

Далі знаходиться середнє квадратичне відхилення кожного стовпчика матриці:

$$\tilde{\sigma}_i = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{L=1}^{n}(\tilde{X}_{iL} - \overline{\tilde{X}})^2}\,. \tag{1.120}$$

Кожне значення вихідної матриці центрується та нормується на середнє квадратичне відхилення:

$$X_{iL} = \frac{X_{iL} - \overline{\tilde{X}}}{\tilde{\sigma}_i}. \tag{1.121}$$

Ця процедура необхідна для приведення усіх значень матриці до одному порядку. Розраховується середнє та середньоквадратичне відхилення для нової центрованої та нормованої матриці $\boldsymbol{X}$ по формулах

(1.119) та (1.120). Для матриці ***X*** знаходиться приєднана матриця кореляції $\boldsymbol{R_{xy}(m\times m)}$, у полі якої – коефіцієнти кореляції між всіма предикторами, а останній стовпчик - це коефіцієнти кореляції предиктанту ***У*** з кожним із предикторів ***X***:

$$R_{xy} = \begin{pmatrix} 1 & r_{x1x2} & r_{x1x3} & \dots & r_{x1y} \\ r_{x2x1} & 1 & r_{x2x3} & \dots & r_{x2y} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{yx1} & r_{yx2} & r_{yx3} & \dots & 1 \end{pmatrix}. \qquad (1.122)$$

Потім проводиться аналіз останнього стовпчика матриці R_{xy} та вибирається найбільше значення коефіцієнту детермінації

$$\max[r_{yxi}^2]; \quad i = \overline{1,m} \ . \qquad (1.123)$$

Предиктору, який має максимальний r^2, привласнюється номер один. На другому кроці будується за допомогою МНК рівняння регресії

$$\hat{y}^{(1)} = A_1 X_1 \ , \qquad (1.124)$$

та знаходиться перша різниця

$$\xi_{1i} = y_i - \hat{y}_y^{(1)} \ . \qquad (1.125)$$

Далі розраховується частковий коефіцієнт кореляції між ξ_{1i} та всіма предикторами, що залишились, тобто

$$r_{\xi_{1i} X_i} \qquad i = \overline{2,m} \ . \qquad (1.126)$$

Другий значний предиктор вибирається з умови (1.123) і йому привласнюється другий номер. Будується рівняння регресії з двома предикторами по МНК.

Процедура продовжується до тих пір, поки коефіцієнт кореляції значний. Його значність оцінюється по критерію Ст'юдента (t).

У результаті будується рівняння регресії вигляду

$$\hat{y} = A_1 X_1 + A_2 X_2 + \dots + A_k X_k + A_0 \ , \qquad (1.127)$$

яке утримує ***k*** статистично значних предикторів, які вичерпують основну частину дисперсії предиктанту.

Зв'язки між забрудненням повітря і метеопараметрами являються складними та нелінійними. Це заважає використанню методу лінійної регресії для практичних схем. Але в деяких випадках його використання можливе та доцільне. Умовою його використання з'являється наявність достатнього лінійного зв'язку між характеристиками забруднення повітря та окремими предикторами. Між предикторами лінійного зв'язку не повинно бути.

Один значний коефіцієнт лінійної кореляції (між P і P') гарантований. Необхідна наявність лінійного зв'язку між показником ЗА і хоча би одним параметром. Коефіцієнти регресії розраховуються за МНК. На рівні значності 5% беруть найбільше значення.

Для підвищення ефективності схем прогнозу ЗП методом множинної лінійної регресії можливо попереднє виключення нелінійного зв'язку між характеристиками забруднення повітря та метеопараметрами. Для цього по матеріалам спостережень в кожному місті виконують перетворення предикторів з обліком справжнього вигляду зв'язків між ними та предиктантом.

Перетворення міститься в тому, що за допомогою кривих або таблиць залежностей показника забруднення повітря (P, Q, α) від окремих метеопараметрів, побудованих по використаному для розробок матеріалу спостережень, кожне значення предиктора замінюється на відповідне йому значення характеристики ЗП (середні P, Q, або α_1). Зв'язок перетворених предикторів з предиктантами близький до лінійного.

Рівняння регресії може мати вигляд:

$$Q = a_0 + a_1 Q' + a_2 Q(T_0) + a_3 Q(\Delta T') + a_4 Q(\upsilon_0). \qquad (1.128)$$

Ефективність прогностичної схеми підвищується, якщо в якості предиктора використовувати кількісно синоптичну ситуацію Sn. Виправдовуваність може досягати 95%, а аномально високого забруднення (P≥0,5) - 100%.

Таким чином, спосіб визначення нелінійності зв'язків між ЗП та метеопараметрами дозволяє врахувати в схемах прогнозу, розроблених по методу множинної лінійної регресії, справжній вигляд залежності. Це визнано задовольняє ефективність практичних схем. Але цей метод гірше ніж метод графічної регресії, тобто не дозволяє врахувати неоднозначність зв'язків, тобто різний характер зв'язку між ЗП та будь-якими предикторами при різних значеннях іншого предиктора.

1.18 Методи нелінійності регресії. Прогнозування забруднення повітря методом розпізнавання образів (МРО)

Один з простіших варіантів МРО складається з визначення схожості конкретної ситуації з ситуацією, характерною для якої-небудь групи

забруднення (високого, підвищеного, зниженого). Пропонується 3 групи значень параметру Р:

I група – Р>0,35;

II група – 0,35≥Р>0,20;

III група - Р≤0,20.

У залежності від рівня забруднення атмосфери можливі інші варіанти поділу Р на групи [2, 8].

Схожість ситуацій тут встановлюється по “відстані” між ними. Під ситуацією розуміють набір характеристик (предикторів), які супроводжують РЗП у деякий фіксований момент часу . Такими характеристиками є значення метеопараметрів і показники ЗА в місті у попередні моменти часу.

Ситуація з деякими характеристиками (предикторами) $X_1, X_2, ..., X_n$ може бути представлена як точка у *n*–мірному просторі (фазовому просторі ситуацій). Якщо значення РЗА поділити на декілька груп, тоді ситуації у фазовому просторі також поділяються на 3 групи; I – відповідна великому вмісту домішок у повітрі; II група – середньому; III – малому. Усередині групи I відстані між точками X і Y можна визначити

$$\rho_I^2(X,Y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(X_i - Y_i)^2}{(\sigma_i^I)^2}, \qquad (1.129)$$

де $(\sigma_i^I)^2$ - дисперсія у групі I уздовж і-ої осі, тобто предиктора. Аналогічні співвідношення використовуємо у групі II і III.

Під відстанню від деякої точки *f* до групи I приймається відстань від *f* до центру ваги цієї групи, тобто до точки з координатами:

$$\overline{X}_i^I = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} X_{ij}, \qquad (1.130)$$

де підсумовування проводиться по усім *m* значенням кожного предиктора, який входить до складу групи I. Інакше кажучи , $\overline{X}_i^I$ - середнє значення *i*-ої характеристики (предиктора) у даній групі. Тоді відстань від точки *f* до центру ваги групи I визначається

$$\rho_I^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{(X_i - \overline{X}_i^I)^2}{(\sigma_i^I)^2} \qquad (1.131)$$

тут $$(\sigma)_i^I = \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}(X_{ji} - \overline{X}_i^I)^2, \qquad (1.132)$$

$j=\overline{1,m}$ - перебор по усім точкам поданого предиктора.

$i=\overline{1,n}$ - належність до того або іншого предиктора.

Аналогічно визначається відстань від *f* до груп II і III. Приймається, що точка *f* у фазовому просторі ситуацій належить до тієї групи, відстань від якої мінімальна. Прогностична схема зводиться до визначення середніх значень і дисперсій предикторів відповідних кожній групі забруднення (*P*) – високому, підвищеному або зниженому *P*. При складанні прогнозу обчислюються "відстані" від прогнозованої ситуації до отриманих груп, і цю ситуацію відносять до групи, до якої відстань мінімальна (рис. 1.3). У теперішній схемі прогностична значність предикторів визначається різницею як їх середніх значень, так і дисперсій. Використання даних про дисперсії предикторів дозволяє при прогнозі додатково враховувати реальний характер залежностей між ЗП та метеоумовами. З формули (1.131) видно, що зі збільшенням дисперсії росте участь відповідного предиктора у створеванні рівня концентрацій. Предиктори з малими значеннями дисперсії збільшують загальну відстань. Важлива різниця дисперсій по групам. При рівних значеннях ненормованих різниць точка відноситься до тієї групи, де $\boldsymbol{\sigma}$ велике. Або точка у фазовому просторі відноситься до групи з маленькою дисперсією предикторів, якщо геометрична відстань від точки до центру ваги поданої групи мала.

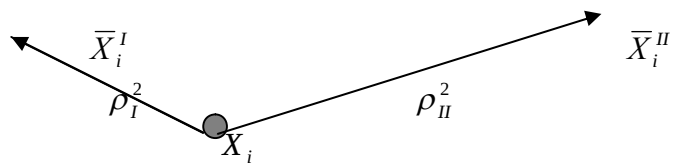


Рис. 1.3 – Схема вибору віднесення предиктору X_i до I або II групи забруднення повітря за найменшою відстанню

Схема була реалізована на ЕОМ в багатьох містах у зимовий та літній сезони. Розподіл Р по групах іноді був таким: I група - $P>0.25$; II - $0.25\geq P>0.15$; III - $P\leq 0.15$. У вигляді предикторів були P'; υ_0 – швидкість вітру на рівні флюгеру; υ – швидкість вітру на висоті 500м від рівню Землі; $\Delta T=T_0-T_{925\ гПа}$; T_0 – температура у землі ; $\Delta P/\Delta n$ – градієнт приземного тиску (гПа /1^0 меридіану); H_2 – нижня межа піднесеної інверсії (при приземній інверсії H_2 =0). У більшості випадків різниця середніх різних груп суттєва, або суттєва різниця дисперсії. Прогностична схема ефективна як по використаному (на якому проводився етап вивчення), так і по незалежному матеріалу. Виправдовуваність для усіх міст 73-75%. На незалежному матеріалі 70-76%.

Достойністю поданого методу є найкраще, ніж у методі лінійної регресії, урахування реального вигляду зв'язків між показниками ЗП і МУ. Але при складних зв'язках (наявність 2-х максимумів ЗП в залежності від метеофакторів) до однієї групи надходять суттєво різні значення предикторів. Тому при використанні поданого методу найкраще вибирати такі предиктори, з якими зв'язок ЗП є монотонний.

1.19 Метод послідовної графічної регресії (МПГР)

Він дозволяє найбільш повно врахувати відомі закономірності і виявлені зв'язки між концентрацією домішок у повітрі та метеопараметрами у конкретному місті.

Реалізація методу.

1 етап – будуються попередні графіки на кожному з котрих представляються залежності предиктанта від двох предикторів.

2 етап – проводиться попарне об'єднання графіків.

3 етап – отримання остаточного графіка, на якому предиктант - функція всіх предикторів. Кількість предикторів не обмежується [2, 8].

Для вибору та включення до схеми прогнозу предикторів важлива наявність у будь-якому вигляді зв'язку між ними та ЗП по матеріалах спостережень в даному місті. Можна відмітити, що вигляд зв'язку значення не має, на відміну від методу розпізнавання образів, де наявність складного зв'язку, наприклад, бімодального, виключає можливість використання предиктору. У деяких випадках зв'язок між ЗП та окремим параметром має нечіткий вираз, але він краще виявляється якщо його розглядають при заданих значеннях іншого параметру (наприклад, залежність ЗП від швидкості вітру при різних становищах термічної стійкості атмосфери – метод послідовної графічної регресії дозволяє прослідкувати такий неоднозначний зв'язок).

Ніяких обмежень до вибору пар предикторів у МПГР не існує. Але з обліком фізичних думок бажано відокремити два предиктора так, щоб характер зв'язку між ЗП та одним з них залежав від значення іншого (наприклад: температура повітря T і швидкість вітру υ; висота приземної термічної інверсії $H_{пз}$ і P' та інше).

Прогностична схема по МПГР. Нехай попередній аналіз виявив зв'язок предиктора з 4-мя предикторами. Для прогнозування P за дневні строки (7,13 и 19 годин) до схеми включают υ_0 за 6 годин; υ_1 і $\Delta T_{0\text{-}750}$ – за радіозондом у строк 03 години.

Один графік будують відкладаючи по осям координат υ_0 і ΔT, так як характер залежності ЗП від швидкості вітру визначається стійкістю атмосфери. Інша пара предикторів υ_1 і P'. Тоді предиктант представимо як функцію:

$$P = F\,[\Pi_1(\upsilon_0, \Delta T), \Pi_2(\upsilon_1, P')]. \qquad (1.133)$$

На кожному з попередніх графіків (рис. 1.4 та 1.5) в залежності від значень предикторів у відповідних точках перехрещення перпендикулярів пишуться значення параметру *P* за весь строк спостережень. Наступне завдання – проведення ізоліній ЗП: у чистому вигляді це неможливо, так як 2 предиктора однозначно не визначають РЗП. В ідеалі графіки поділяються на квадрати, в кожному з яких визначається характеристика ЗП – середні значення *P* або повторюваність *П* підвищених значень *P* , а потім проводяться ізолінії цих характеристик. Реально розподіл графіків на квадрати не роблять із-за недостатнього числа значень предиктанта у деяких частинах графіку. Задача спрощується, так як з попереднього аналізу матеріалів спостережень у даному місті встановлюється характер зв'язків, а значить, конфігурація областей на графіках, де повинні переважати високі і низькі значення предиктанта.

Таким чином розрахунок характеристик ЗП проводиться у відокремлених областях раніше відомої форми. Зручно проводити ізолінії повторюваності *[П]* підвищених значень *P*, наприклад, випадки з $P \geq 0,3$. Але може бути і $P > 0,25$.

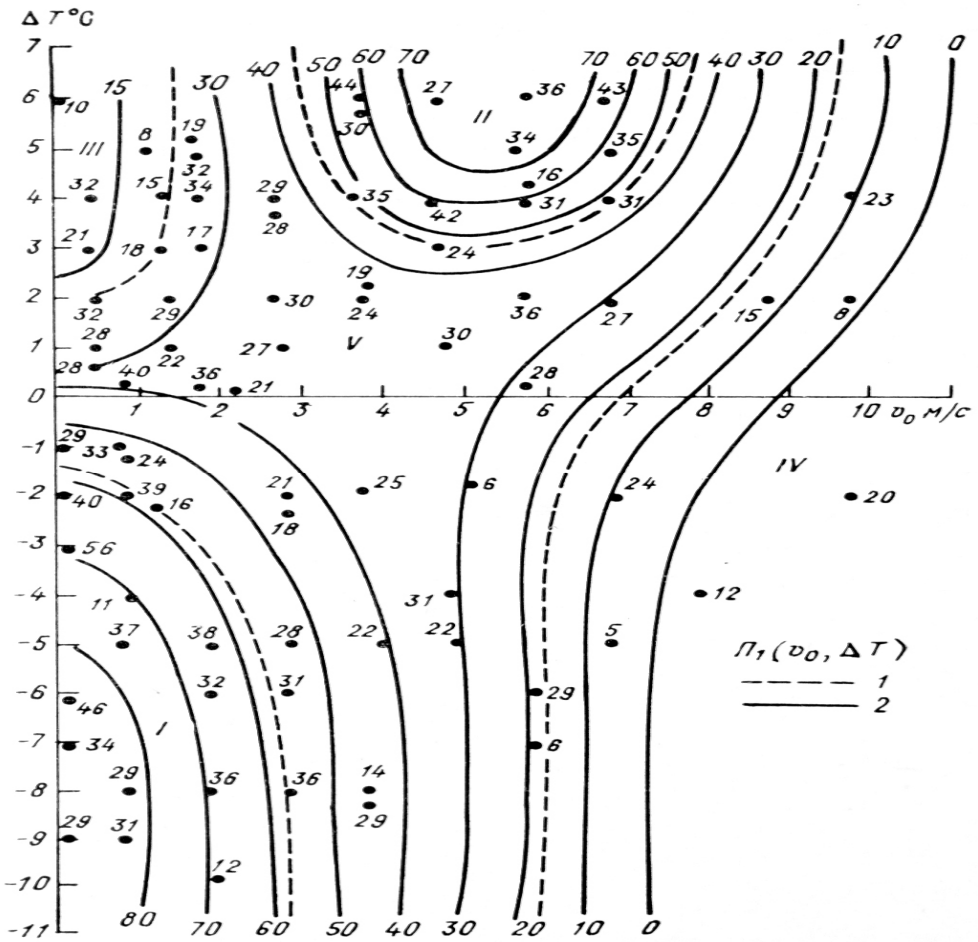


Рис. 1.4 - Перший попередній графік $П_1$ $(v_0, \Delta T)$ [8]

На першому попередньому графіку відокремлено 5 областей різних *П₁ (υ₀, ΔT)* підвищене ЗП при сполуці дуже слабкого вітру та інверсії у нижньому шарі (I) і при сполуці вітру 5-6 м/с і позитивних значень *ΔT* (область II). Область з низьким ЗП виявляється: при відносно сильному вітрі, особливо у випадку нестійкої термічної стратифікації (область IV), і при сполуці дуже слабкого вітру і нестійкій термічній стратифікації (обл. III). Між ними – область V проміжна. При відокремлені областей врахували фактичне розповсюдження значень Р. В область I і II $П_1 \approx 70\%$, в область III $П_1 \approx 20\%$, в область IV $П_1 = 0$, в область V $П_1 \approx 30\%$ ($П_1$ – імовірність попадання в ці області підвищених значень Р).

II-й попередній графік - проведені ізолінії $П_2$ (υ_1, Р). Попередньо було встановлено, що в середньому ЗП знижається з посиленням вітру на рівні 925 гПа і при дуже малих υ_1.

Р збільшується з збільшенням Р'. На графіку відокремлені 3 області зі значенням $П_2$ (υ,Р') з імовірністю підвищених Р в них 80, 50 та 10% та проведені ізолінії $П_2$.

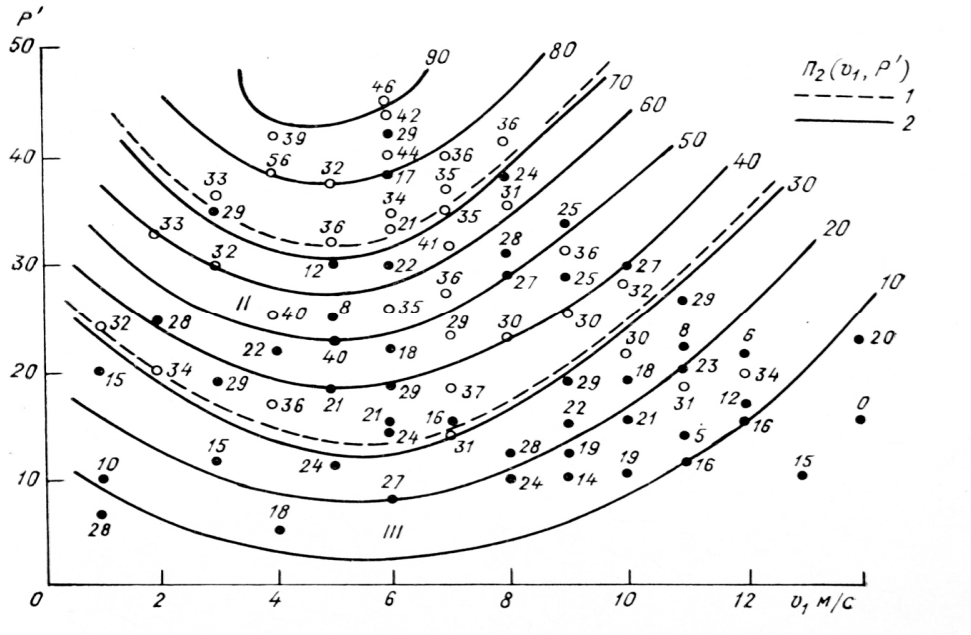


Рис. 1.5 – Другий попередній графік $П_2$ (υ_1, Р')

Потім для кожного дня використаного рядка спостережень за щоденними значеннями υ_0, і ΔТ були отримані $П_1$, а по υ_1 і Р' – $П_2$. Значення $П_1$ і $П_2$ є координатами остаточному графіку. Значення $П_1$ і $П_2$ можуть розглядатися як комплексні предиктори, вони встановлюються з урахуванням реального виду зв'язків ніж ЗП і метеопараметрами з урахуванням фактору в конкретному місті. Кореляція Р з новими комплексними предикторами ($П_1$ і $П_2$) виявляється достатньо тісною, що дозволяє на остаточному графіку проводити ізолінії предиктанту Р. Процедура слідуюча: відокремлюються 3 області, відповідні 3 групам Р.).

Р збільшується зі збільшенням $П_1$ і $П_2$, тому вигляд ізоліній як на остаточному графіку (рис. 1.6). Області відокремлюються таким чином, щоб виправдовуваність прогнозів груп ЗП за використаним матеріалом була максимальною. Ізолінія 0,35 розділяє І і ІІ гр.; 0,20 – ІІ і ІІІ групи ЗП. Решта ліній паралельна.

Таким чином прогностична схема, яка розроблена за МПГР, дозволяє прогнозувати Р. Головне тут - виділення на графіку 3 областей відповідних групам високого, підвищеного, зниженого РЗА.

Урахування реально існуючих зв'язків між ЗП і МУ, а також попереднього РЗА – головна перевага даного методу. При графічному представленні фактичних даних у деякій ступені враховуються невідомі закономірності. При цьому не робиться ніяких попередніх припущень у вигляді залежностей.

Схема була реалізована за матеріалами спостережень у Донецьку. Тут відсутні аерологічні спостереження. Після попереднього аналізу були вибрані предиктори: T_0, υ_0, P', ΔH_{850}.

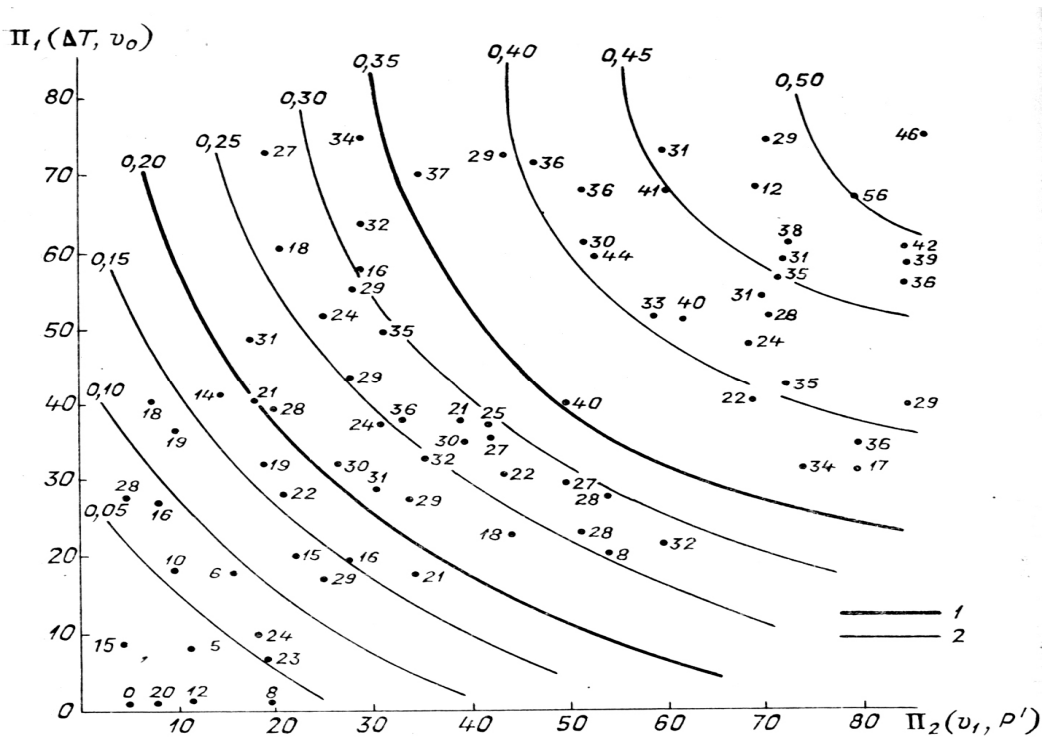


Рис.1.6 – Остаточний прогностичний графік за МПГР

Пономаренко за даними спостережень у Києві побудував графіки окремо для випадків приземної інверсії, піднесеної інверсії та відсутності інверсії у нижньому шарі атмосфери.

Побудовані за фактичним матеріалами графіки є прогностичними. Прогностична схема ЗП по місту в цілому за МПГР перевірялась на незалежному матеріалі в різних містах . Було складено близько 1000

прогнозів груп ЗП. Виправдовуваність 80-90%, що перевищує виправдовуваність випадкових прогнозів, і на 10-20% перевищує успішність інерційних прогнозів. Висока виправдовуваність прогнозів РЗА І групи (*P>0.35*): на залежному матеріалі - 78% (72/% на незалежному). Прогностична схема пройшла масові випробування і дуже успішно використовується в практиці прогнозу ЗП.

1.20 Оцінка ефективності методів прогнозу забруднення повітря

Ефективність методів прогнозу забруднення повітря (ЗП) можливо встановити шляхом розрахунку коефіцієнта кореляції r між прогностичними та розрахованими за фактичними даними значеннями узагальненого показника ЗП у місті. Така оцінка може бути виконана тільки для тих методів, які дозволяють передбачати значення предиктантів (параметрів *P* и *Q*), для методів послідовної графічної регресії та множинної лінійної регресії.

Метод розпізнавання образів дозволяє прогнозувати лише групу забруднення у місті, тому його ефективність не може бути оцінена за допомогою r.

Ефективність методу прогнозу ЗП можливо вважати задовільною, якщо $r \geq 0{,}7$ – у цьому випадку метод враховує не менш половини загальної мінливості предиктора.

Проте, у практичній роботі частіше враховують не очікуване значення параметра ЗП у місті, а очікувану групу забруднення - високе (I), підвищене (II), знижене (III). Це і було покладено у основу оцінки прогнозів ЗП у місті.

Перевірка виправдовуваності прогнозів забруднення повітря по місту у цілому проводиться відповідно з таблицею 1.4.

Таблиця 1.4 - Оцінка виправдовуваності прогнозів забруднення повітря по місту у цілому

Прогностична група	Градація значень параметру P, при яких прогноз вважається виправданим
I. $P > 0{,}35$	$P \geq 0{,}30$
II. $0{,}35 \geq P > 0{,}20$	$0{,}38 \geq P \geq 0{,}17$
III. $P \leq 0{,}20$	$P \leq 0{,}25$

Критерії для розподілу значень параметру *P* на групи та оцінки прогнозів, які представлені у таблиці 1, були запропоновані при підготовці матеріалів для впровадження розроблених методів з урахуванням того, що повторюваність I, II, III груп складає приблизно 10, 40 та 50%. Проте в

різних містах статистичний розподіл *P* неоднаковий, тому іноді можна рекомендувати у I групу включати $P \geq 0.30$ чи 10% найбільших значень *P*. Як критерій для розподілу II та III груп приймається середнє значення параметру *P*.

Аналогічний підхід використовується для розподілу на групи нормованих середніх по місту концентрацій *Q*. Наприклад, з урахуванням статистичного розподілу *Q* при розробці схеми прогнозу ЗП розділення на групи можна провести так: I група – значення $Q>1,5$ (прогноз вважається виправданим при $Q>1,3$); II група $1,5 \geq Q > 1$ ($1.7 \geq Q \geq 0.8$); III група значення $Q \leq 1$ ($Q \leq 1,2$).

Для оцінки ефективності прогностичної схеми слід виходити з перевищення виправдовуваності прогнозів груп ЗП над повторюваністю градацій параметру *P*, при яких прогноз був виправданим. Так, повторюваність градації, при якій виправдовується прогноз I групи ($P \geq 0,30$) складає близько 15%. Фактично виправдовуваність таких прогнозів перевищує 80%.

Оцінка виправдовуваності прогнозів I групи може проводитись на етапі випробування розроблених схем та у випадку, коли відомо, що підприємства не перейшли до здійснення заходів по регулюванню викидів. Якщо ж регулювання викидів проводиться і визначає зниження ЗП, тоді для оцінки такого прогнозу значення *P*, що фактично спостерігалися, замінюють його можливими значеннями, які відповідають здійсненому комплексу метеорологічних факторів.

Суттєва оцінка підвищення виправдовуваності методичних прогнозів над випадковими. При цьому виправдовуваність випадкових прогнозів U_0, згідно Г.А. Багрову, може дорівнювати:

$$U_0 = \varphi_1\pi_1 + \varphi_2\pi_2 + \varphi_3\pi_3, \qquad (1.134)$$

де φ_1, φ_2, φ_3 – повторюваність кожної з трьох градацій параметру P;

π_1, π_2, π_3 – частота прогнозів кожної з цих градацій.

Як вже відзначалось, повторюваність I групи ЗП у місті складає у середньому 10%, II групи – 40%, III – 50%. Можна припустити, що частота прогнозів цих груп приблизно така ж. Тоді π_1= 0,10; π_2= 0,40; π_3= 0,50. Якщо врахувати прийняті допуски для оцінки прогнозу (дивись табл.1.4), тоді φ_1 = 0,2; $\varphi_2 \approx$ 0,6; $\varphi_3 \approx$ 0,65. За цим виправдовуваність випадкових прогнозів U_0 складає приблизно 58%.

Як міру успішності можна використовувати запропоновану Н.А. Багровим величину:

$$H^* = \frac{U - U_0}{1 - U_0}, \qquad (1.135)$$

де U_0 – виправдовуваність прогнозу (в частках одиниці). Значення H^* для ефективних прогнозів не повинно бути менше 0,2-0,3. Для випадку прогнозу ЗП по місту у цілому H^* суттєво переважає вказане значення. В середньому для багатьох міст $U \approx 0{,}85$. Тоді $H^* \approx 0{,}67$.

Оцінки прогнозів ЗП від окремих джерел неможливо проводити за значеннями концентрації. При великій кількості різних джерел викидів у місті важко виділити концентрації, які обумовлені конкретним джерелом. Тому у цьому випадку прогнози оцінюються відповідно з виправдовуваністю прогнозів метеоелементів, які входять до встановлених несприятливих комплексів.

Після переходу до оперативного прогнозування ЗП основне значення приймає оцінка ефективності прогнозів по ступеню реального зменшення кількості викидів та пониження концентрацій домішок у цьому повітрі під час несприятливих метеоумов (НМУ). Для виконання такої оцінки враховуються заходи, які реально виконувались на об'єктах у несприятливий час, і якщо це можливо, кількісно оцінюються ступень пониження викидів та зменшення розрахованих концентрацій домішок. Проте найбільш суттєвим показником ефективності робіт по прогнозуванню ЗП є фактичне пониження приземних концентрацій за рахунок регулювання викидів.

1.21 Організація робіт по прогнозуванню забруднення повітря. Складання попереджень

З досвіду прогнозування ЗП у ряді міст і практичного проведення заходів по забезпеченню чистоти повітряного басейну під час НМУ розроблені організаційні питання.

Організація прогнозування у будь-якому місті починається з виконання розробок за місцевими матеріалами. Вивчаються зв'язки між концентраціями та метеоумовами (МУ) формулюються прогностичні правила, встановлюються комплекси метеопараметрів (МП), при яких можуть утворюватися високі рівні забруднення повітря (ВРЗП) за рахунок викидів конкретних джерел, складаються статистичні схеми для прогнозу забруднення по місту у цілому. Потім проводяться випробування і у випадках позитивних результатів схеми упроваджуються у практику. Але їх упровадження не зупиняє роботи, так як схеми можна та необхідно удосконалювати.

Таким чином, обов'язок спеціалістів по прогнозуванню ЗП – **виконання регіональних розробок.** Обидва вида прогнозу ЗП – у районі окремих джерел і по місту у цілому - складаються паралельно. Прогнози даються щоденно 2 рази на день: на прикінці дня – на наступний день, у ранці – уточнений прогноз на поточний день.

Споживачами прогностичної інформації є підприємства, які здійснюють регулювання викидів: СЕС, ДАЇ, підрозділи Мінекобезпеки, виконавчі органи. Прогнози передаються споживачам тільки у випадку, коли очікується ВРЗП. У цьому випадку складається **попередження**.

Розроблена система попереджень трьох ступенів небезпеки. Кінцева мета заходів у період дії попереджень – зниження концентрації домішок до рівня ГДК. Але в деяких містах існує перевищення ГДК часто і при відсутності НМУ, тому нереально добиватися досягнення рівня ГДК у небезпечні періоди. Тому попередження складаються на основі очікуємих НМУ з урахуванням відповідного РЗП, різного в різних містах. Для випадку окремого джерела таким рівнем є розрахована максимальна концентрація домішки S_m.

Умови, при яких складаються попередження.

У випадку окремих джерел попередження I ступеню небезпеки складаються, коли прогнозується один з комплексів НМУ і за цим у даному місті S_m хоч би однієї з домішок перевищує ГДК.

Попередження II ступеню небезпеки складаються, якщо прогнозуються два таких комплексу (якщо при небезпечній швидкості вітру очікується піднесена інверсія та несприятливий напрямок вітру), за цим у даному місті S_m >3ГДК.

Попередження III ступеню небезпеки складаються у випадку, коли після передачі попередження другого ступеню небезпеки вступна інформація показує, що при метеоумовах, які зберігаються, прийняті засоби не забезпечують необхідну чистоту атмосфери. За цим у даному місті S_m >5ГДК.

Якщо підприємство, яке обслуговується знаходиться у місті де відсутнє регулярне вимірювання концентрації домішок у повітрі, тоді попередження III ступеню не складаються.

У випадку прогнозів по місту у цілому підставою для складання попереджень про відносно високий РЗП є очікуєме значення узагальненого показника.

За цим попередження I ступеню складається, якщо очікуються значення узагального показника, який входить до 10%-вої групи найбільших значень. Принцип урахування ГДК зберігається такий, як і для окремих джерел.

Для Р (як предиктора) розрахованого за сукупностю домішок, частіше всього в 2%-ву групу найбільших значень входять $P>0,5$; у 10%-ву - $P>0,35$.

За цим умови складання попереджень:

1.попередження I ступеню небезпеки, якщо очікується $0,5 \geq P > 0,35$. За цим S_m >ГДК; 2.попередження II ступеню небезпеки, якщо очікується $P>0,5$. За цим у місті S_m >3ГДК; 3.попередження III ступеню небезпеки, якщо після передачі попередження II ступеню залишається ВРЗА і очікується зберігання НМУ. За цими у місті S_m >5ГДК.

Отже, якщо у місті S_m ≥3ГДК,тоді можна складати попередження тільки першого ступеню небезпеки, якщо 3ГДК < S_m ≤ 5ГДК – попередження двох ступенів небезпеки, якщо S_m >5ГДК – попередження трьох ступенів небезпеки.

У містах, де ГДК практично не досягається (повторюваність концентрацій, які перевищують ГДК, менше 2%), попередження про НМУ не складається.

Основою для складання попередження є очікувані НМУ, за якими можуть утворюватися ВРЗП. Встановлюється задача: з урахуванням завчасного прогнозу досягти запобігання росту концентрацій домішок у повітрі.

Цей підхід відрізняється від закордонного, де при складанні попереджень (тревог), враховуються критичні рівні концентрацій домішок у повітрі. У нас основою для складання оповіщення є знаходження високих концентрацій, якщо ці концентрації раніше не прогнозувались. Це може бути або внаслідок невірного метеорологічного прогнозу, або внаслідок, того, що значне збільшення концентрації здійснилось за рахунок великого збільшення викидів при відсутності НМУ. Оповіщення складаються трьох ступенів небезпеки відповідно з висловленими принципами.

Питання для самоперевірки

1. Яке місце належить “Моделюванню та прогнозуванню стану довкілля” у рядку інших дисциплін природоохоронного профілю?
2. Що ми розуміємо під поняттям “модель”?
3. Які існують види прогнозів забруднення атмосферного повітря?
4. Назвіть фізичні основи прогнозу забруднення атмосфери.
5. Назвіть терміни, прийняті у чисельних та синоптико-статистичних прогнозах.
6. Що таке предиктант та предиктори?
7. У чому полягає фізичний смисл рівняння балансу для будь-якої субстанції?
8. Назвіть внутрішні та зовнішні причини притоку та стоку забруднювальних речовин у рівнянні балансу атмосферних домішок.
9. У чому полягають початкові та граничні умови?
10. Що є пасивні атмосферні домішки?
11. Як розповсюджуються пасивні домішки від миттєвих та безперервних джерел при постійному коефіцієнті турбулентності?
12. Що є функція впливу джерела викиду?
13. Рішення рівняння балансу атмосферних домішок при стаціонарних процесах для граничного шару атмосфери.
14. Які особливості впливу орографії на розповсюдження домішок від джерела?

15. Яка характеристика забруднення атмосферного повітря у містах прогнозується у чисельних прогнозах?
16. Як впливає забруднення атмосфери на термічний режим міст?
17. Яким чином ураховуються особливості термодинамічного стану повітря у прогнозі максимальної концентрації шкідливої домішки від окремого джерела за дифузійною моделлю?
18. Які особливості застосування гаусової моделі розповсюдження шкідливої домішки від окремого джерела?
19. Як впливає напрям та швидкість вітру на забруднення атмосфери у місті?
20. Які особливості впливу на рівень забруднення атмосфери її термічної стійкісті та умов застою повітря?
21. Як впливає температура повітря на рівень забруднення атмосфери?
22. Як впливають опади, хмари, тумани на рівень забруднення атмосфери?
23. У чому полягає фізичний смисл інерційного фактору?
24. У чому полягає **в**плив мікрометеорологічних умов у місті на формування рівня забруднення.
25. Які особливості ***с***иноптичні умов, що сприяють формуванню високого рівня забруднення повітря у місті та регіонах?
26. Які основні принципи розробки питань прогнозу забруднення повітря в цілому по місту?
9. Які існують статистичні методи прогнозу забруднення атмосфери?
10. У чому суть узагальнених інтегральних показників забруднення атмосфери у місті?
11. Як здійснити вибір предикторів до статистичного прогнозу?
12. Назвіть деякі прогностичні правила забруднення повітря в цілому по місту.
13. Який комплексний показник прогнозують у методі метеорологічних умов забруднення атмосфери (МУЗ)?
14. У чому суть методу прогнозу на основі множинної лінійної регресії?
15. У чому суть прогнозування забруднення повітря методом розпізнавання образів?
16. Назвіть порядок прогнозування забруднення повітря методом послідової графічної регресії.
17. Які результати випробувань прогностичних схем?
18. О чому свідчить досвід оперативного прогнозування забруднення повітря?
19. Які питання треба розглянути при організуванні робіт по прогнозуванню забруднення повітря?
20. Скільки і які існують категорії попереджень очікуємого підвищеного рівня забруднення атмосфери?
21. Для чого застосовується критерій М.А.Багрова?

2 МОДЕЛЮВАННЯ І ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ВОДНОГО СЕРЕДОВИЩА

2.1 Поняття математичної моделі і математичного моделювання

Над дослідженнями різних процесів та явищ на основі математичних моделей вчені працюють давно. Існують моделі, які справили великий вплив на розвиток різних галузей науки. Наприклад: модель ідеального газу привела до системи рівнянь Ейлера, які описують нев'язкі потоки газів; у гідродинаміці широко використовуються моделі на основі рівнянь Нав'є-Стокса.

Математичною моделлю будемо називати математичний опис законів і характерних особливостей протікання даного процесу чи явища.

Математичне моделювання полягає у розв'язанні поставленої математичної задачі і оцінці області використання одержаного результату.

Для розв'язання математичних моделей використовують аналітичні, графічні та числові методи. Прості моделі можна розв'язати і аналітично, і графічно. Але більш складні математичні моделі можна розв'язувати тільки числовими методами, які набули розповсюдження з появою ЕОМ.

Числові методи дозволяють звести розв'язання задачі до виконання остаточного числа арифметичних дій над числами. Результат при цьому також виходить у вигляді числових значень.

При використанні числових методів виникають похибки через застосування наближених чисел і при апроксимації функцій. Тому основна вимога, яка ставиться до обранного числового методу, полягає в одержанні кінцевого результату з потрібною точністю, тобто необхідно щоб числовий метод не вносив значних похибок у обчислювання.

Математичні моделі більшості гідрологічних і екологічних процесів дуже складні. Розв'язання цих моделей при вельми широкій постановці можливе лише числовими методами, використання яких припускає застосування ЕОМ. Отже, основною метою цього курсу є правильне використання існуючих моделей при розв'язанні конкретних гідрологічних задач в екології числовими методами.

Математичне моделювання складається з таких етапів:

- постановка задачі і визначення кінцевої мети;
- побудова (вибір) математичної моделі;
- вибір числового методу;
- розробка алгоритму і побудова блок-схеми;
- розробка програми (запис алгоритму розв'язання на мові програмування);
- налагодження програми;
- підготовка вихідних даних і проведення розрахунків;
- аналіз результатів.

Метою математичного моделювання є дослідження процесів і явищ для прийняття вірних інженерних рішень.

2.2 Точність експериментів

2.2.1 Наближені числа

ЕОМ обробляють числа, які записані в формах з фіксованою і плаваючою точкою.

Десяткові числа з фіксованою точкою – це звична нам форма запису: 5,16; -13,673 і т.д. Тут замість десяткової коми в ЕОМ ставиться десяткова точка.

Іншою формою подання чисел є запис числа з плаваючою точкою. Наприклад: $5427*10^{-1}$; $5,427*10^{2}$; $0,5427*10^{3}$. Останній запис числа називається нормалізованою формою запису числа з плаваючою точкою. Цей запис і використовується в ЕОМ. Таким чином, число N десяткове чи у системі числення з основою λ можна зобразити у вигляді:

$$N = \pm\, 0,a_1a_2a_3 \ldots a_к*10^{\,n}$$

чи

$$N = \pm\, 0,a_1a_2a_3 \ldots a_к*\lambda^{\,n}. \qquad (2.1)$$

Підмножина цих чисел не є нескінченною, вона визначається розрядністю k і межами порядку n_1, n_2 ($n_1 \le n \le n_2$). Межі n_1 і n_2 визначають обмеженість дійсних чисел, а розрядність k - дискретність їх розподілення на числовій осі.

Наприклад, у випадку десяткових чотирирозрядних чисел усі значення, які знаходяться в інтервалі 0,2562 і 0,2563, відображаються на ЕОМ як число 0,2562 (просте відкидання цифр за межами розрядної сітки). Різнниця між двома сусідніми значеннями дорівнює одиниці останнього розряду. Меньші за цю різницю числа ЕОМ бере як нулі.

При округленні вручну десяткове чотирирозрядне число 0,2562 може бути одержане з чисел в інтервалі від 0,25615 до 0,25625.

Таким чином, наближеними є усі числа, одержані за рахунок округлення чи відкидання цифр, що виходять за розрядну сітку.

Усі інженерні розрахунки як вручну, так і на ЕОМ виконуються з наближеними значеннями дійсних чисел. Мірою точності наближених чисел є похибка.

2.2.2 Абсолютна та відносна похибки, гранична похибка

Розрізняють два види похибок – абсолютну і відносну.

Абсолютна похибка являє собою різницю поміж справжнім значенням числа (X) та його наближенням (A):

$$\Delta x = X - A. \qquad (2.2)$$

Відносна похибка – це відношення абсолютної похибки числа до його наближеного значення:

$$\delta x = \Delta x / A. \qquad (2.3)$$

Як правило, зазвичай справжнє значення величини X невідоме. Є лише її наближене значення A і необхідно знайти граничну похибку Δa цього значення. Гранична похибка є верхньою межею модуля абсолютної похибки $|\Delta x| \le \Delta a$.

Значення Δa приймаються як абсолютна похибка наближеного значення числа A. У цьому випадку справжнє значення X знаходиться в інтервалі (A – Δa; A + Δa).

Для наближеного числа, яке одержано у випадку округлення, абсолютна похибка дорівнює половині одиниці останнього розряду числа. Наприклад, значення a = 0,728 могло бути одержане у результаті округлення 0,72752 або 0,72845. При цьому $|\Delta x| \le 0{,}0005$. Таким чином Δa = 0,0005.

При обробці на ЕОМ округлення звичайно не виконуються, а цифри, що виходять за розрядну сітку, відкидаються. Наприклад, значення a = 0,728 могло бути отримане з чисел 0,72802 чи 0,72899.

Гранична абсолютна похибка у цьому випадку в два рази більша і складає Δa = 0,001.

Граничне значення відносної похибки являє собою відношення граничної абсолютної похибки до абсолютної величини наближеного числа:

$$\delta a = \Delta a / | A |. \qquad (2.4)$$

Наприклад: $\delta(-2{,}3) = 0{,}05/|-2{,}3| \approx 0{,}022 \approx 0{,}03$. Похибка завжди округлюється у більшу сторону.

Наведені оцінки похибки справедливі за умови, якщо всі значущі цифри наближеного числа вірні.

Значущими вважаються всі цифри числа, починаючи з першої, яка відмінна від нуля. Наприклад, 0,0024 - у цьому числі дві значущі цифри, а в числі 12,00 - чотири. При зміненні форми запису числа кількість значущих цифр не повинна змінюватися, тобто необхідно дотримуватись рівносильності перетворень. Наприклад: $7500 = 0{,}7500*10^4$ і $0{,}110*10^2 = 11{,}0$ - записи рівносильні; а записи $7500 = 0{,}75*10^4$ і $0{,}110*10^2 = 11$ - нерівносильні.

2.2.3 Правила оцінки похибок при обчисленні

Сформулюємо тепер правила оцінки граничних похибок при виконанні операцій з наближеними числами:

гранична абсолютна похибка суми чи різниці наближених чисел дорівнює сумі граничних абсолютних похибок цих чисел:

$$\Delta(a \pm в) = \Delta a + \Delta в; \qquad (2.5)$$

гранична відносна похибка добутку чи частки від поділу двох наближених чисел дорівнює сумі граничних відносних похибок цих чисел:

$$\delta(a*в) = \delta a + \delta в,$$
$$\delta(a / в) = \delta a + \delta в; \qquad (2.6)$$

при піднесенні числа до ступеня гранична відносна похибка збільшується на показник ступеня:

$$\delta(a^k) = k*\delta a\ . \qquad (2.7)$$

Існують такі джерела похибок:

математична модель, прийнятна для опису процесу, несе похибку через неможливість врахування усіх факторів, під впливом яких розвивається процес, тут важливо визначати область застосування;

похибки вихідних даних (непереборні похибки);

похибки числового методу (апроксимації та інтерполяції функцій, зрізання рядів);

похибки за рахунок округлення на ЕОМ;

переведення чисел з однієї системи числення в іншу.

2.3 Статистичне моделювання стану водного середовища

В основі статистичного моделювання і прогнозування лежать просторово-тимчасові узагальнення закономірностей розвитку процесів або зв'язків цих процесів з факторами, які зумовлюють їх. Тобто в основі статистичного моделювання і прогнозування лежить статистична обробка результатів спостережень.

Зупинимося докладніше на деяких моментах математичної статистики, які найчастіше застосовуються у гідрології, метеорології та екології.

2.3.1 Підбір емпіричних формул

Помилки результатів вимірів

Використовувані для побудови емпіричних залежностей результати вимірів можуть містити в собі наступні види помилок: систематичні, випадкові й грубі.

Систематичні помилки звичайно дають відхилення в одну сторону (як правило вони з тим самим знаком). По величині вони можуть бути

постійними або змінними. Систематичні помилки можуть бути викликані умовами експерименту, дефектом вимірювальних апаратур, її поганим регулюванням і т.п. Ці помилки усувають шляхом налагодження апаратур, введенням відповідних виправлень.

Випадкові помилки є наслідком великої кількості факторів, які не можуть бути усунуті або враховані в належній мірі при вимірюваннях або при обробці результатів цих вимірів. Ці помилки носять випадковий характер, відхиляються в той чи иншій бік від середнього значення при повторенні експериментів і не можуть бути усунуті при вимірах. З імовірнісної точки зору математичне очікування випадкової помилки дорівнює нулю. Статистична обробка експериментальних даних дозволяє визначити величину випадкової помилки, а повторення вимірів достатню кількість разів дозволяє довести її до деякого прийнятного значення.

Грубі помилки явно викривлюють результати вимірів, звичайно вони пропадають при повторенні експериментів. Ці помилки істотно виходять за межі випадкових помилок. Результати з такими помилками відкидають і при остаточній статистичній обробці вихідних даних не враховують.

Емпіричні формули

Проаналізувавши вихідні дані на наявність помилок, приступають до побудови емпіричної формули. Ця операція складається із двох етапів: добір загального виду формули й визначення найкращого значення вхідних до неї параметрів.

Часто вид залежності відомий з фізичних міркувань. У такому випадку приступають відразу до визначення її параметрів. Якщо ж характер залежності невідомий, то вид формули може бути довільним. Перевага віддається зазвичай простим формулам. Вони вибираються спочатку з геометричних міркувань: експериментальні точки наносяться на графік і приблизно вгадується загальний вид залежності шляхом порівняння отриманої кривої із графіками відомих функцій (лінійної, степеневої, експонентної, гіперболічної або багаточлена).

Найпростішою емпіричною формулою є рівняння прямої. Близькість експериментального розподілу точок до лінійної залежності легко проглядається після побудови графіка. Параметри визначаються відповідно до послідовності, яку показано в табл. 2.1 (с. 74).

У деяких випадках до лінійної залежності можуть бути зведені й інші експериментальні дані, графік яких у декартовій системі координат не є прямою лінією. Це може бути досягнуто введенням нових змінних ξ і η замість X и У: $\xi = \varphi(X,У)$; $\eta = \psi(X,У)$.

Функції $\varphi(X,У)$ і $\psi(X,У)$ підбираються такими, щоб точки (ξ_i, η_i) лежали на деякій прямій лінії в площині (ξ, η). Таке перетворення називається вирівнюванням даних.

Для одержання лінійної залежності $\eta = c\xi + d$ вихідна формула повинна бути записана у вигляді: $\psi(X,У) = c\,\varphi(X,У) + d$.

Наведемо приклади вирівнювання деяких функцій:

а) степеневої -

$У = aX^b \rightarrow Ln\ У = Ln\ a + b\ Ln\ X \rightarrow \{\eta = Ln\ У;\ \xi = Ln\ X\};$ (2.8)

б) експонентної -

$У = a\ exp(bX) \rightarrow Ln\ У = Ln\ a + bX \rightarrow \{\eta = Ln\ У;\ \xi = X\};$ (2.9)

в) гіперболічної -

$У = (a + bX)^{-1} \rightarrow 1/У = a + bX \rightarrow \{\eta = 1/У;\ \xi = X\};$ (2.10)

г) розподілення Вейбула -

$У = exp(-aX^b) \rightarrow Ln(1/У) = aX^b \rightarrow Ln\ Ln(1/У) = Ln\ a + b\ Ln\ X \rightarrow$ (2.11)

$\rightarrow \{\eta = Ln\ Ln(1/У);\ \xi = Ln\ X\}.$

Іншою використовуваною емпіричною формулою є багаточлен к-ого порядку: $У = a_0 + a_1X + a_2X^2 + \ldots + a_mX^m$. Найчастіше використовується багаточлен другого порядку, рідше - третього.

При наявності декількох змінних $У(X_1, X_2, \ldots, X_m)$ зв'язок установлюють у вигляді $У = a_0 + a_1X_1 + a_2X_2 + \ldots + a_mX_m$ (множинна лінійна регресія).

Параметри емпіричної залежності

Будемо вважати, що тип емпіричної залежності нам відомий й її можна представити у вигляді: $У = \varphi(X, a_0, a_1, \ldots a_m)$, де φ - відома функція; a_j – невідомі постійні параметри ($j = 0, 1, 2, \ldots, m$).

Завдання полягає в тім, щоб визначити такі значення цих параметрів, при яких емпірична формула дає добре наближення заданої функції.

Ми знаємо, що шукана залежність не проходить через всі задані точки. Відхилення шуканої функції в точках X_i від заданої позначимо ε_i, тоді $\varepsilon_i = \varphi(X_i, a_0, a_1, \ldots a_m) - У_i$, $i = 1,2...n$.

Задача знаходження найкращих значень параметрів $a_0, a_1, \ldots a_m$ зводиться до деякої мінімізації відхилень ε_i. Існує кілька способів рішення цієї задачі. Розглянемо три з них.

<u>Метод обраних точок</u>

За заданим значенням перебуває система точок на площині ХОУ й проводиться плавна лінія, яка найбільш близько примикає до заданих точок. На цій лінії вибираються точки, число яких повинне бути рівним числу шуканих параметрів (m+1). Координати цих точок $(X_j^0, У_j^0)$ ретельно виміряються й використовуються для запису умови проходження графіка емпіричної функції через обрані точки:

$$\varphi(X_j^0, a_0, a_1, \ldots, a_m) = У_j^0,\ j = 0, 1, 2, ..., m.$$

За цією системою рівнянь оцінюють значення параметрів емпіричної функції.

Метод середніх

Сутність методу полягає у тому, що параметри шуканої залежності визначаються за умови рівности нулю суми відхілень ε_i:

$$\sum_{1}^{n} \varepsilon_i = \sum_{1}^{n}(\varphi(X_i, a_0, a_1, \dots a_m) - У_i) = 0.$$

Це рівняння використовується для пошуку параметрів a_j. З єдиного рівняння неможливо однозначно знайти (m+1) параметрів, тому ε_i розбивається довільно на систему з (m+1) рівняннями:

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = 0;$$
$$\varepsilon_4 + \varepsilon_5 + \varepsilon_6 = 0;$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots\dots$$
$$\varepsilon_{n-1} + \varepsilon_n = 0.$$

Розв'язуючи цю систему рівнянь, визначають невідомі параметри a_j.

Метод найменших квадратів

Основа методу полягає у тому, що пошук параметрів a_j (j = 0, 1, 2, ..., m) виконується за умови мінімуму суми квадратів відхілень ε_i (i = 1, 2, …, n):

$$S = \sum_{1}^{n} \varepsilon_i = \sum_{1}^{n}(\varphi(X_i, a_0, a_1, \dots a_m) - У_i)^2 = \min.$$

Параметри a_j є незалежними змінними функції $S = S\ (a_0, a_1, \dots a_m)$. Мінімум функції знаходиться за умови, коли часткові похідні по цих параметрах дорівнюють нулю:

$$\partial S/\partial a_0 = 0,$$
$$\partial S/\partial a_1 = 0,$$
$$\dots\dots\dots\dots$$
$$\partial S/\partial a_m = 0.$$

Параметри a_j визначають з одержаної системи рівнянь.

2.3.2 Підбір параметрів рівняння регресії

Рівняння прямої має вигляд:

$$У = aX + b, \qquad \text{або} \qquad X = a_x У + b_x\ , \qquad (2.12)$$

де a - кутовий коефіцієнт, який чисельно дорівнює тангенсу кута нахилу прямої до осі ОХ;
a_x - аналогічно a, але до осі ОУ;
b і b_x – значення У при Х = 0 і Х при У = 0.

Якщо b чи b_x дорівнює 0, рівняння набуває вигляду:

$$У = aX, \quad \text{чи} \quad X = a_x У. \tag{2.13}$$

При обробці даних спостережень за двома змінними, що знаходяться в лінійній залежності, задача зводиться до пошуку параметрів a і b, причому таких параметрів, при яких відхилення емпіричних точок від теоретичної прямої, задовольняло б визначену умову. Найчастіше використовується умова найменшого значення суми квадратів відхилень емпіричних точок від теоретичної залежності. Спосіб визначення параметрів залежності за такої умови одержав назву “методу найменших квадратів”, а саме рівняння прямої називається рівнянням регресії.

Припустимо, що є n парних спостережень $X_iУ_i$. Необхідно визначити рівняння регресії й оцінити його точність.

Необхідну умову методу можна записати таким чином:

$$S = \Sigma(У_i - У_P)^2 = \Sigma[У_i - (aX_i + b)]^2 = \min. \tag{2.14}$$

Сума (2.14) при тому самому наборі $X_iУ_i$ є функцією двох змінних a і b. Знайдемо параметри a і b за умови, що сума (2.14) мінімальна. Для цього необхідно взяти перші похідні від згаданих зміних і прирівняти їх до 0:

$$S_a' = \{\Sigma[У_i - aX_i - b]^2\}' = 2\Sigma[(У_i - aX_i - b)(- X_i)] = 0;$$
$$S_b' = \{\Sigma[У_i - aX_i - b]^2\}' = 2\Sigma[(У_i - aX_i - b)(-1)] = 0. \tag{2.15}$$

Розкриваючи дужки, одержуємо:

$$\Sigma X_iУ_i = a\Sigma X_i^2 + b\Sigma X_i;$$
$$\Sigma У_i = a\Sigma X_i + nb. \tag{2.16}$$

Віднімемо тепер від X_i і $У_i$ їхні середні значення X_C і $У_C$, тобто центруємо ці змінні (графічно такий прийом означає перенесення початку системи координат у точку $X_CУ_C$):

$$\Sigma(X_i - X_C)(У_i - У_C) = a\Sigma(X_i - X_C)^2 + b\Sigma(X_i - X_C);$$
$$\Sigma(У_i - У_C) = a\Sigma(X_i - X_C) + nb.$$

З огляду на те, що $\Sigma(X_i - X_C) = \Sigma(У_i - У_C) = 0$, одержимо

$$\Sigma(X_i - X_C)(У_i - У_C) = a\,\Sigma\,(X_i - X_C)^2\,;$$
$$nb = 0.$$

З цього кутовий коефіцієнт

$$a = \frac{\Sigma(X_i - X_C)(У_i - У_C)}{\Sigma(X_i - X_C)^2}\,. \qquad (2.17)$$

Рівняння регресії буде мати вигляд:

$$(У - У_C) = \frac{\Sigma(X_i - X_C)(У_i - У_C)}{\Sigma(X_i - X_C)^2}\,(X - X_C)\,. \qquad (2.18)$$

Аналогічно кутовий коефіцієнт a_x буде дорівнювати:

$$a_x = \frac{\Sigma(X_i - X_C)(У_i - У_C)}{\Sigma(У_i - У_C)^2}\,. \qquad (2.19)$$

Якщо емпіричні точки лежать на одній прямій, то добуток а й a_x дорівнює одиниці. Якщо ж спостерігається розкид, то лінії $У=aX+b$ і $X=a_xУ+b_x$ не збігаються. Причому, чим більший розкид, тим більший кут між лініями.

Як міру розкиду використовують корінь з добутку кутових коефіцієнтів а й a_x, що одержав назву коефіцієнта кореляції

$$r_{xy} = \sqrt{a\,a_x} = \frac{\Sigma(X_i - X_C)(У_i - У_C)}{\sqrt{\Sigma(X_i - X_C)^2\,\Sigma(У_i - У_C)^2}}\,, \qquad (2.20)$$

або

$$r_{xy} = \sqrt{a\,a_x} = \frac{\Sigma(X_i - X_C)(У_i - У_C)}{(n-1)\sigma_x\,\sigma_y}\,,$$

де $\sigma_x = \sqrt{\Sigma(X_i - X_C)^2/(n-1)}$ і $\sigma_y = \sqrt{\Sigma(У_i - У_C)^2/(n-1)}$.

При $r = \pm 1$ спостерігається лінійний зв'язок; при $r \approx 1$ спостерігається нелінійна залежність; при $r = 0$ залежність відсутня.

У такому випадку рівняння регресії можна записати у вигляді:

$$(У - У_C) = \frac{\sigma_y}{\sigma_x} r_{xy} (X - X_C). \qquad (2.21)$$

Мірою точності рівняння регресії є середнє квадратичне відхилення емпіричних точок від лінії регресії:

$$S_y = \sqrt{\Sigma \frac{(У_i - У_p)^2}{n}} . \qquad (2.22)$$

Розрахунок параметрів рівняння регресії (2.21) простий (табл.2.1): по рядах спостережень X_i і $У_i$ визначаються середні значення X_C і $У_C$; далі формуються нові ряди $(X_i - X_C)$; $(У_i - У_C)$; $(X_i - X_C)^2$; $(У_i - У_C)^2$ і $(X_i - X_C)(У_i - У_C)$. По цих рядах визначаються σ_x, σ_y та r_{xy}; оцінюється точність отриманої залежності S_y.

Таблиця 2.1 - Розрахунок параметрів рівняння регресії

n	X_i	$У_i$	$\Delta X_i = X_i - X_C$	$\Delta У_i = У_i - У_C$	ΔX_i^2	$\Delta У_i^2$	$\Delta X_i * \Delta У_i$	$(\Delta X_i + \Delta У_i)^2$
1	2	3	4	5	6	7	8	9

Перевірка $\Sigma (4) = 0$; $\Sigma (5) = 0$; $\Sigma (9) = \Sigma (6) + \Sigma (7) + 2\Sigma (8)$

2.3.3 Режимні функції висоти хвиль

Забезпеченість висоти хвиль у режимі й системі

Режимна функція висоти хвиль, як випадкової величини, являє собою закон її розподілення в часі. Вона дозволяє знайти забезпеченість F_P (імовірність перевищення) заданого значення висоти хвиль і навпаки: по заданій частоті оцінити висоту хвиль. У цій функції висота характеризує не тільки енергію хвилі, але й силу шторму, тобто режимна функція практично дозволяє оцінити частоту виникнення штормів різної сили. Як характерна може бути використана середня висота хвиль у штормі. При проектуванні різних гідротехнічних споруд розглядають шторми, що виникають із частотою 1 раз в 25, 50 або 100 років (4, 2 або 1% у режимі).

Тут необхідно відзначити, що частота й забезпеченість мають різні значення для однієї й тієї ж хвилі. Нижче буде наведена формула, по якій перераховується необхідна частота в забезпеченість.

Крім режимної забезпеченості висоти хвиль існує поняття їхньої системної забезпеченості. Будь-якій шторм - це система хвиль, у якій їхня висота являє собою випадкову величину з деяким законом розподілення. На цей час параметри цього розподілення визначені. Вони залежать від співвідношення середньої довжини хвиль і глибини ділянки водного об'єкта, на якому спостерігається розглянуте хвилювання. Значення

перехідних коефіцієнтів k_C від середньої висоти хвиль у системі (у штормі) до деякої висоти із забезпеченістю F_C для різних умов представлені в табличній формі [14]. По суті справи висота хвилі з будь-якою забезпеченістю в системі може бути використана, як характерна для шторму. На практиці найчастіше розглядають середнє значення висоти хвиль і із забезпеченістю 5, 3, 1, 0,1% у системі.

Режимна функція будується за середнім значенням висоти хвиль у випадку, якщо вона розраховується за даними спостережень за швидкістю вітру. При побудові режимної функції за даними спостережень за хвилюванням, як характерна виступає $h^{(3)}$ (значення висоти хвиль із забезпеченістю 3% у системі), оскільки теоретично вважається, що відповідно до методики проведення спостережень за хвилюванням на гідрологічних постах результати спостережень мають 3%-ну забезпеченість у системі.

Прогноз штормів і висот хвиль рідкої повторюваності необхідний при проектуванні різних гідротехнічних споруд для забезпечення їхньої стійкості під впливом хвиль, а також для оцінки ймовірності аварійних ситуацій на цих спорудах і розрахунків розмірів збитків, у тому числі й екологічних, при розробці розділів ОВНС.

Побудова режимної функції й прогноз висоти хвиль

Прогнозування режиму хвилювання виконується в такий спосіб:

- за даними спостережень будується режимна функція для характерної висоти хвиль h;
- потім по частоті 1 раз в n років (1/n) розраховують відповідну їй забезпеченість F_P і по режимній функції знаходять значення висоти хвиль h_P з відповідною частотою в режимі;
- по h_P і відповідному перехідному коефіцієнту k_C (табл. 2.2) знаходять $h_P^{(C)}$ значення висоти хвиль із забезпеченістю F_C у системі.

Режимні функції висоти хвиль можуть бути побудовані по восьми румбах: З, ПнС, С, ПдС, Пд, ПдЗ, З та ПнЗ. Однак розглядаються при прогнозуванні не всі ці напрямки, а тільки хвиленебезпечні, тобто ті, у яких спостерігається найбільша довжина розгону хвиль і найбільш часті й сильні вітри.

Побудову режимної функції можна виконти графічно і аналітично.

Графічна методика.

а) Для кожного хвиленебезпечного напрямку діапазон можливих значень висоти хвиль розбивається на інтервали (наприклад, як у табл. 2.3) і за результатами спостережень підраховується кількість випадків m_i попадання значень висоти хвиль на розглянуті інтервали й загальну кількість випадків хвилювання розглянутого напрямку $n_H = \sum m_i$.

б) Далі розраховується імовірність p_i(%) попадання на інтервали й імовірність напрямку P_H(%) по формулах:

$$p_i = 100\, m_i / N \quad \text{й} \quad P_H = 100\, n_H / N, \qquad (2.23)$$

де N - загальна кількість спостережень в усіх напрямках.

в) Для лівої межі інтервалів визначається безумовна забезпеченність $F_{Бi}$ шляхом підсумовування p_i у порядку убування значень висоти хвиль (див. табл. 2.3) і умовна забезпеченість F_{Pi} за формулою:

$$F_{Pi} = 100\ F_{Бi} / P_H. \qquad (2.24)$$

Значення F_{Pi} називається умовним, оскільки характеризує забезпеченість висоти хвиль за умови, коли спостерігається хвилювання розглядуваного напрямку (імовірність напрямку береться за 100%).

г) За значеннями лівої межі інтервалів h_i і відповідним їм значенням F_{Pi} будується графік зв'язку $F_P = f(h)$ (див. рис. 2.1).

При побудові зв'язку $F_P = f(h)$ припускають, що h_i розподілені за законом Вейбула. Тому для вирівнювання даної залежності (див. п. 2.3.1) використовується клітинка (рис.2.1) з осями координат, трансформованими відповідно до (2.11).

Прогноз характерної висоти хвиль із частотою 1 раз на n років виконується по побудованій режимній функції. Для цього:

- необхідна частота 1/n перераховується [14] у відповідну забезпеченість F_P(%) за формулою

$$F_P = 100\ \Delta t_{шт} / (T_Б\ n\ P_H), \qquad (2.25)$$

де $\Delta t_{шт}$ – середня тривалість шторму, діб (за відсутності спостережень для морів дорівнює 0,5 діб, для океанів - 0,75 діб);
$T_Б$ – середня тривалість безльодового періоду, діб;
P_H – імовірність розглянутого напрямку (у частках від одиниці);

- по F_P оцінюється характерна висота хвилі h_P.

Для переходу від характерної до необхідної висоти хвиль у системі використовуються перехідні коефіцієнти k_C (табл. 2.2)

Таблиця 2.2 – Перехідні коефіцієнти k_C (для $H / \lambda \geq 0{,}5$, де H - середня глибина акваторії; λ - середня довжина хвиль)

F_C, %	45,7	13	5	3	1	0,1
k_C	1,00	1,61	1,94	2,10	2,40	2,94

Аналітична методика. Вигляд закону розподілу висоти хвиль в часі відомий – це закон розподілу Вейбула

$$F_P = exp(-\alpha h^{\beta}), \qquad (2.26)$$

де α і β – параметри закону розподілу.

Знайти ці параметри можна при статистичній обробці результатів спостережень. Для цього необхідно спочатку вирівняти вихідні дані (тобто привести нелінійну залежність до лінійного вигляду):

$$F_P = exp(-\alpha h^{\beta}) \rightarrow 1/F_P = exp(\alpha h^{\beta}) \rightarrow Ln(1/F_P) = \alpha h^{\beta} \rightarrow$$

$$\rightarrow lnln(1/F_P) = ln\alpha + \beta lnh \rightarrow \{У = lnln(1/F_P);\ X = lnh\} \rightarrow$$

$$\rightarrow У = \alpha^* + \beta X. \qquad (1.27)$$

Методом найменших квадратів можна знайти параметри отриманого рівняння регресії, вони будуть рівні:

$$\beta = r_{XУ}\, \sigma_У/\sigma_X\,, \qquad (1.28)$$

$$\alpha^* = У_{СЕР} - \beta X_{СЕР}, \qquad (1.29)$$

де $r_{XУ}$ – коефіцієнт кореляції руду X и ряду $У$;

$\sigma_У$ – середньоквадратичне відхилення ряду $У$;

σ_X – середньоквадратичне відхилення ряду X;

$У_{СЕР}$ – середнє значення ряду $У$;

$X_{СЕР}$ – середнє значення ряду X.

Всі ці характеристики визначаються шляхом статистичної обробки результатів спостережень за формулами:

$$X_{СЕР} = (\Sigma X_i)/n; \qquad У_{СЕР} = (\Sigma У_i)/n; \qquad (1.30)$$

$$\sigma_X = [(\Sigma(X_i - X_{СЕР})^2)/(n\text{-}1)]^{0,5}; \qquad \sigma_У = [(\Sigma(У_i - У_{СЕР})^2)/(n\text{-}1)]^{0,5}; \qquad (1.31)$$

$$r_{XУ} = [\Sigma(У_i - У_{СЕР})(X_i - X_{СЕР})]/[(n\text{-}1)\, \sigma_У\, \sigma_X\,]. \qquad (1.32)$$

Послідовність розрахунку така:

- члени ряду спостережень за хвилюванням $h_i^{(3)}$ ранжируються в спадному порядку і нумеруються;

- за номером члена ряду розраховується режимна забезпеченість за формулою:

$$F_{Pi} = i/(n+1), \qquad (1.33)$$

де i – номер члена ранжируваного ряду;

n – кількість членів ряду;

- по ряду F_{Pi} розраховується ряд $У_i$=$lnln(1/F_{Pi})$, а по ряду $h_i^{(3)}$

розраховується ряд $X_i = lnh_i$;

- для рядів *У* і *X* розраховуються середні значення, середньоквадратичні відхилення і коефіцієнт кореляції;
- за цими характеристиками визначаються параметри α^* и β;
- розраховується параметр $\alpha = exp(\alpha^*)$;
- для кожного члена ряду F_{Pi} розраховується відповідне йому $h^{(3)}_{Pi}$ за формулою

$$h^{(3)}_{Pi} = [(1/\alpha)\, ln(1/F_{Pi})]^{1/\beta}; \qquad (1.34)$$

- перевіряється точність апроксимації:

$$S = [(\Sigma(h^{(3)}_i - h^{(3)}_{Pi})^2)/n]^{0,5}, \qquad (1.35)$$
$$S_H = S/h^{(3)}_{CEP},$$

де $h^{(3)}_{CEP}$ – середнє значення ряду спостережень за хвилюванням;

- за формулою (1.23) розраховується F_P и за формулою (1.36) розраховується $h^{(3)}_P$;
- за $h^{(3)}_P$ и за табл. 1.2 розраховуються $h^{(5)}_P$, $h^{(1)}_P$ и $h^{(0,1)}_P$.

Для переходу від характерної до необхідної висоти хвиль у системі використовуються перехідні коефіцієнти k_C (табл. 2.2).

2.4 Моделювання розповсюдження забруднювальних речовин у водному середовищі

2.4.1 Процеси розповсюдження речовини у водному середовищі

Перенесення речовини у турбулентному потоці відбувається за рахунок таких процесів:

а) адвекція;

б) осідання завислої речовини;

в) турбулентна дифузія;

г) молекулярна дифузія.

Молекулярну дифузію зазвичай не розглядають через те, що інтенсивність цього процесу мізерно мала в порівнянні з іншими процесами.

<u>Адвекція</u>

Перенесення речовини у потоці із середньою швидкістю цього потоку називається адвективним переносом (адвекцією).

Розглянемо деякий потік. Визначемо площину, перпендикулярну до осередненого вектора швидкості V_C цього потоку, і виділимо на ній площадку $\Delta\omega$. Нехай середня концентрація речовини в перетині дорівнює

С. За час Δt контрольну площадку перетне деяка кількість речовини Δm з деяким об'ємом води ΔW. Ця кількість речовини буде дорівнювати

$$\Delta m = \Delta WC.$$

Одинична витрата (інтенсивність переносу) речовини в цьому випадку буде дорівнювати

$$q_A = \Delta m / (\Delta t \Delta \omega) = \Delta WC / (\Delta t \Delta \omega) = LC/\Delta t = V_C C. \qquad (2.26)$$

Якщо розглянути проекції вектора переносу речовини в потоці на осі довільної системи координат, то

$$q_{AX} = V_X C; \; q_{AY} = V_Y C \;\; \text{і} \;\; q_{AZ} = V_Z C. \qquad (2.27)$$

<u>Осідання завислої речовини</u>

Формулу одиничної витрати речовини за рахунок її осідання можна одержати аналогічно. За час Δt з об'єму ΔW горизонтальну поверхню з площадкою $\Delta \omega$ перетне кількість речовини Δm. Кількість речовини буде дорівнювати

$$\Delta m = \Delta WC.$$

Одинична витрата (інтенсивність переносу) речовини буде дорівнювати

$$q_o = \Delta m / \Delta t \Delta \omega = \Delta WC / \Delta t \Delta \omega = LC/\Delta t = uC, \qquad (2.28)$$

де u – швидкість осідання частинок (гідравлічна крупність).

<u>Турбулентна дифузія</u>

Турбулентна дифузія речовини відбувається за рахунок пульсації швидкості потоку.

$$(q_T)_y = -DdC/dy, \qquad (2.29)$$

де D - коефіцієнт турбулентної дифузії.

2.4.2 Моделювання розповсюдження речовини у турбулентному потоці

У турбулентних потоках явище пульсації швидкостей супроводить перемішування водних мас. Домішки, що потрапили у ту або іншу частину потоку, під впливом турбулентного перемішування розповсюджуються в суміжні струмені. Це приводить до розводження домішок, тобто до зниження їх концентрації. За певних умов на деякій відстані від місця

скиду стічних вод концентрація домішок може стати як завгодно малою. Таким чином може відбутися гідродинамічне “очищення потоку”.

Нарівні з гідродинамічним, очищення потоку відбувається також за рахунок хімічних і біологічних процесів.

Сумісна дія цих факторів приводить до повного очищення потоку. Однак найбільш швидке зниження концентрацій домішки у водах потоку відбувається за рахунок турбулентного перемішування.

Розрахунок розводження стічних вод є основним при оцінці гранично допустимих скидів домішок у потоки. Ці розрахунки виконуються різними методами, які можна поділити на дві основні групи: спрощені і детальні.

Розглянемо детальний метод розрахунку розводження стічних вод.

Вивід рівняння турбулентної дифузії

Виділимо у турбулентному потоці [12] паралелепіпед (рис. 2.3) об’ємом dW = dxdydz. Сторони цього паралелепіпеда рівнобіжні осям координат, що проходять таким чином: площина XOZ рівнобіжна вільній поверхні потоку, а ось ОУ спрямована вертикально вниз. Грані паралелепіпеда, перпендикулярні до осі ОХ, позначимо 1 і 2; перпендикулярні до OZ – 3 і 4; перпендикулярні до ОУ – 5 і 6.

Концентрацію забруднювальної речовини в точках, розташованих у центрах граней паралелепіпеда, пронумеруємо відповідно (будемо вважати, що середні концентрації на гранях розташовані в їх центрах). Проекції середньої швидкості - $V_X V_Y V_Z$.

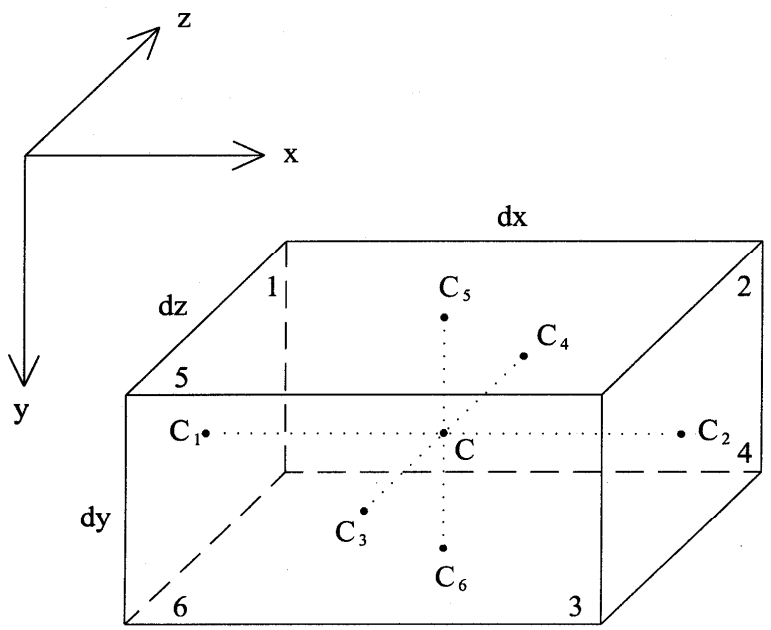


Рис. 2.3 - Схема до виводу рівняння турбулентної дифузії

Розглядуваний контрольний паралелепіпед закріпимо жорстко в просторі й оцінимо, як зміниться концентрація завислої у воді речовини за час δt у нашому паралелепіпеді. Гідравлічну крупність речовини у воді позначимо u, а середній перенос речовини через одиницю поверхні позначимо q_C. Процеси надходження і виносу речовини в нашому паралелепіпеді здійснюються за рахунок адвективного переносу, турбулентної дифузії й осідання частинок.

Кількість речовини, що надійшла в паралелепіпед через грань 1 за рахунок адвекції (m_{A1}) і турбулентної дифузії (m_{T1}), дорівнює:

$$m_1 = m_{A1} + m_{T1} = d\omega_1\delta t q_{A1} + d\omega_1\delta t q_{T1} = dydz\delta t\,(V_X C_1 + q_{T1}). \quad (2.30)$$

Кількість речовини, винесеної з паралелепіпеда через другу грань, відповідно дорівнює

$$m_2 = dydz\delta t\,(V_X C_2 + q_{T2}). \quad (2.31)$$

Зміна кількості речовини за рахунок її надходження через грань 1 і виносу через грань 2 дорівнює

$$\Delta m_{12} = m_1 - m_2 = dydz\delta t[V_X(C_1 - C_2) + (q_{T1} - q_{T2})].$$

Виразимо концентрацію C_2 через C_1, позначивши зміну концентрації речовини від грані 1 до грані 2 через $\partial C/\partial x$:

$$C_2 = C_1 + \frac{\partial C}{\partial x}dx \quad \rightarrow \quad (C_1 - C_2) = -\frac{\partial C}{\partial x}dx\,.$$

Аналогічно можна представити різницю величин q_{T1} і q_{T2}:

$$q_{T1} - q_{T2} = -\frac{\partial q}{\partial x}dx = -\frac{\partial}{\partial x}\left(-D_X\frac{\partial C}{\partial x}\right)dx = D_X\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}dx\,.$$

У такий спосіб

$$\Delta m_{12} = dW\delta t\left[-V_X\frac{\partial C}{\partial x} + D_X\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right], \quad (2.32)$$

де $dW = dxdydz$.

Зміна кількості речовини в паралелепіпеді за рахунок надходження її через грань 3 і виносу через грань 4 буде відповідно дорівнювати

$$\Delta m_{34} = dW\delta t[-V_Z \frac{\partial C}{dz} + D_Z \frac{\partial^2 C}{dz^2}]. \qquad (2.33)$$

На відміну від вертикальних надходження і винос через горизонтальні грані 5 і 6 доповнюються осіданням частинок:

$$\Delta m_{O56} = m_{O5} - m_{O6} = dxdz\delta t(q_{O5} - q_{O6}) = dxdz\delta t(uC_5 - uC_6) =$$

$$= dxdz\delta t(uC_5 - uC_6) = dxdz\delta t[u(C_5 - C_6)] = dxdz\delta t[u(-\partial C/\partial y)dy].$$

$$\Delta m_{56} = \Delta m_{A56} + \Delta m_{T56} + \Delta m_{O56} = dW\delta t\,[-V_Y \frac{\partial C}{\partial y} + D_Y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u \frac{\partial C}{\partial y}]\,. \qquad (2.34)$$

Сума величин $\Delta m = \Delta m_{12} + \Delta m_{34} + \Delta m_{56}$ характеризує зміну кількості речовини в паралелепіпеді за час δt. По іншому цю зміну можна записати так:

$$\Delta m = dW\delta t \frac{\partial C}{\partial t},$$

де $\frac{\partial C}{\partial t}$ - зміна кількості речовини в одиниці об'єму за одиницю часу.

Якщо ми тепер усе розділимо на $dW\delta t$, то одержимо

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_Y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_Z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial y} - V_X \frac{\partial C}{\partial x} - V_Y \frac{\partial C}{\partial y} - V_Z \frac{\partial C}{\partial z}. \qquad (2.35)$$

Розглянемо повну похідну концентрації за часом, з огляду на те, що концентрація – функція чотирьох змінних x, y, z, t:

$$\frac{dC(x,y,z,t)}{dt} = \frac{\partial C}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial x}V_X + \frac{\partial C}{\partial y}V_Y + \frac{\partial C}{\partial z}V_Z + \frac{\partial C}{\partial t}.$$

Враховуючи останній вираз, перепишемо отриману формулу:

$$\frac{dC}{dt} = D_X \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_Y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_Z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial y}. \qquad (2.36)$$

Якщо припустити, що D_X, D_Y, D_Z – величини постійні, причому $D_X = D_Z = D_{ГОР}$, а $D_y = D_{ВЕРТ}$, то в кінцевому вигляді одержимо:

$$\frac{dC}{dt} = D_{ГОР} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) + D_{ВЕРТ} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u \frac{\partial C}{\partial y}. \qquad (2.37)$$

Для руслових потоків, де $D_{ГОР} = D_{ВЕРТ} = D$ можна записати

$$\frac{dC}{dt} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) - u \frac{\partial C}{\partial y}. \qquad (2.38)$$

Якщо речовина розчинна чи гідравлічна крупність її частинок дорівнює нулю (u = 0), останній доданок у формулі зникає.

<u>Модель розповсюдження речовини у потоці. Вивід розрахункових формул</u>

У загальному вигляді рівняння турбулентної дифузії консервативної домішки у потоці (при D = const) можна записати таким чином:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_X \frac{\partial C}{\partial x} + V_Y \frac{\partial C}{\partial y} + V_Z \frac{\partial C}{\partial z} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) - u \frac{\partial C}{\partial y}.$$

Розглянемо деякий потік з витратою води Q_E, у який з правого берега скидаються стічні води з витратою $Q_{СТ}$ та концентрацією домішки $C_{СТ}$, фонова концентрація домішки C_E. З лівого берега боковий приплив речовини відсутній, з правого – дорівнює $q_Б$.

В залежності від характеру потоку і особливостей задачі, яка вирішується, рівняння може бути записане з тими або іншими спрощеннями. Розглянемо випадок, коли зміною концентрації домішки по глибині можна знехтувати ($\partial C/\partial y = 0$). У подальшому будемо вважати, що ось OX спрямована уздовж середнього вектора швидкості течії ($V_Y = V_Z = 0$, $V_X = V_C$), гідравлічна крупність частинок дорівнює нулю (u = 0), процес розведення стаціонарний ($\partial C/\partial t = 0$), адвективний перенос домішки у напрямі осі OX набагато більший ніж її турбулентна дифузія у напрямі цієї ж осі ($V_C C >> - D\partial C/\partial x$).

З урахуванням зроблених припущень, граничних та початкових умов модель розповсюдження речовини у потоці буде представлена у такому вигляді:

$$V_C \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2};$$

$$q_П = q_Б, \quad q_Л = 0; \qquad (2.39)$$

$$C(0,z) = C_{CT}, \qquad \text{при } 0 \le z < b;$$

$$C(0,z) = C_E, \qquad \text{при } b \le z \le B_C,$$

де $q_П$ і $q_Л$ – боковий приплив речовини з правого і лівого берегів;
$C(0,z)$ – концентрація речовини у початковому створі;
b – ширина, на якій стічні води у початковому створі витіснюють воду потоку.

Уздовж потоку від джерела забруднення зробимо створи [11] із кроком Δx, по ширині розіб'ємо потік на струмені із кроком Δz (рис. 2.4)

Створи і струмені пронумеруємо, при цьому нумерацію створів позначимо індексом "k", а струменів – індексом "m".

Середнім значенням концентрації домішки у створі в межах кожного струменя припишемо відповідні індекси, будемо вважати, що ці значення концентрації відносяться до центра струменів.

Запишемо рівняння (2.39) у формі кінцевих різниць:

$$V_C \frac{\Delta C}{\Delta x} = D \frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2}. \qquad (2.40)$$

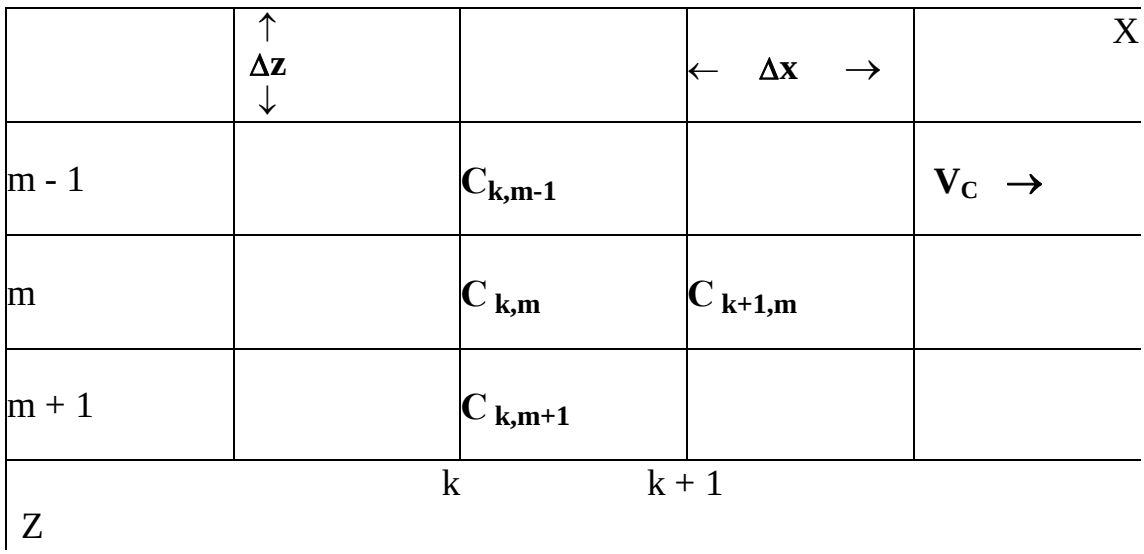


Рис. 2.4 – Нанесення сітки на розрахункову область потоку і нумерація значень концентрацій домішок

Визначимо перші похідні в рівнянні (2.40), використовуючи визначені позначення (рис. 2.4):

$$\frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_{k+1,m} - C_{k,m}}{\Delta x}, \qquad (2.41)$$

$$(\Delta C/\Delta z)_2 = (C_{k,m+1} - C_{k,m}) / \Delta z\ , \ (\Delta C/\Delta z)_1 = (C_{k,m} - C_{k,m-1}) / \Delta z, \qquad (2.42)$$

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{(\Delta C/\Delta z)_2 - (\Delta C/\Delta z)_1}{\Delta z} = \frac{(C_{k,m+1} - C_{k,m}) / \Delta z - (C_{k,m} - C_{k,m-1}) / \Delta z}{\Delta z},$$

звідси

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{C_{k,m+1} + C_{k,m-1} - 2C_{k,m}}{\Delta z^2}. \qquad (2.43)$$

Підставимо (2.41) і (2.43) у (2.40) та перенесемо V_C і Δx у праву частину рівняння, тоді

$$C_{k+1,m} - C_{k,m} = \frac{D\,\Delta x}{V_C\,\Delta z^2}\,[C_{k,m+1} + C_{k,m-1} - 2C_{k,m}]\,. \qquad (2.44)$$

Вирішуючи це рівняння відносно $C_{к+1,m}$, одержимо

$$C_{k+1,m} = a(C_{k,m+1} + C_{k,m-1}) + (1 - 2a)C_{k,m}\ , \qquad (2.45)$$

де $a = D\Delta x/(V_C\,\Delta z^2)$.

Формулу (2.45) можна спростити, прийнявши a = 0,25 , тоді

$$C_{k+1,m} = 0{,}25(C_{k,m+1} + C_{k,m-1}) + 0{,}5C_{k,m}\ , \qquad (2.46)$$

при $\Delta x = V_C\,\Delta z^2/(4D)$. (2.47)

Розв’яжемо рівняння (2.40) для першого струменя за умови видсутності бокового припливу речовини (рис. 2.5):

$$\frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_{k+1,1} - C_{k,1}}{\Delta x}, \qquad (2.48)$$

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{(\Delta C/\Delta z)_2 - (\Delta C/\Delta z)_1}{\Delta z} = \frac{(C_{k,2} - C_{k,1})/\Delta z - 0}{\Delta z},$$

звідси

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{C_{k,2} - C_{k,1}}{\Delta z^2}, \qquad (2.49)$$

$$C_{k+1,1} - C_{k,1} = \frac{D\,\Delta x}{V_C\,\Delta z^2}\,[C_{k,2} - C_{k,1}],$$

$$C_{k+1,1} = aC_{k,2} + (1 - a)C_{k,1},$$

$$C_{k+1,1} = 0{,}25C_{k,2} + 0{,}75C_{k,1}. \qquad (2.50)$$

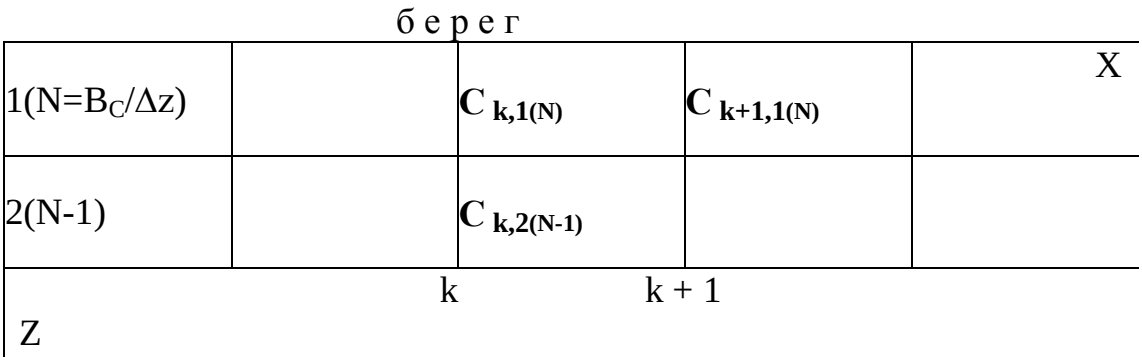


Рис. 2.5 – Нумерація значень концентрацій домішок біля берега

При наявності бокового припливу речовини рішення для струменя N буде мати наступний вигляд:

$$q_Б = H_C q_T = -H_C D\,\partial C/\partial z \quad \rightarrow \quad \partial C/\partial z = -q_Б/(H_C D), \qquad (2.51)$$

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{(\Delta C/\Delta z)_2 - (\Delta C/\Delta z)_1}{\Delta z} = \frac{(C_{k,N-1} - C_{k,N})/\Delta z + q_Б/(H_C D)}{\Delta z},$$

звідси

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{C_{k,N-1} - C_{k,N} + \Delta z q_Б/(H_C D)}{\Delta z^2}. \qquad (2.52)$$

Тоді

$$C_{k+1,N} - C_{k,N} = \frac{D\,\Delta x}{V_C\,\Delta z^2}\left[C_{k,N-1} - C_{k,N} + \frac{\Delta z q_Б}{H_C D}\right],$$

$$C_{k+1,\,N} = a[C_{k,N-1} + \Delta z q_Б/(H_C D)] + (1 - a)C_{k,N},$$

$$C_{k+1,\,N} = 0{,}25[C_{k,N-1} + \Delta z q_Б/(H_C D)] + 0{,}75C_{k,N}. \qquad (2.53)$$

Таким чином, рішення моделі розповсюдження речовини у потоці може бути записано у наступному вигляді:

$C_{k+1,m} = 0{,}25(C_{k,m+1} + C_{k,m-1}) + 0{,}5C_{k,m}$,
при $\Delta x = V_C\Delta z^2/(4D)$, $2 \le m \le (B_C/\Delta z)-1$;
$C_{k+1,1} = 0{,}25C_{k,2} + 0{,}75C_{k,1}$;
$C_{k+1,N} = 0{,}25[C_{k,N-1} + \Delta z q_Б/(H_C D)] + 0{,}75C_{k,N}$;
$C(k,m) = C_{CT}$, при $k = 0$ і $1 \le m \le b/\Delta z$;
$C(k,m) = C_E$, при $k = 0$ і $b/\Delta z < m \le B_C/\Delta z$.

<u>Вихідні дані для розрахунку</u>

Q_E – витрата води у потоці вище місця скиду стічних вод;

C_E – концентрація домішки у воді потоку вище місця скиду (фонова концентрація);

Q_{CT} – витрата стічних вод;

C_{CT} – концентрація домішки у стічних водах;

V_C – середня швидкість потоку на розрахунковій ділянці;

B_C – середня ширина потоку у місті скиду;

H_C – середня глибина потоку на розрахунковій ділянці;

D – коефіцієнт турбулентної дифузії, який розраховується по формулі:

$$D = gH_CV_C/(MC), \qquad (2.54)$$

де C – коефіцієнт Шезі, визначається по таблиці 2.4 в залежності від типу водотоку [11];

$$M = \begin{cases} 0{,}7C + 6, & \text{при } 10 < C < 60, \\ 48, & \text{при } C > 60. \end{cases} \qquad (2.55)$$

Необхідно також знати, у якому місці початкового створу скидаються стічні води ($Z_{ст}$).

Таблиця 2.4 - Типізація водотоків за особливостями гідродинамічного режиму

Тип водотоку	Група	Перемішу-вання	Грунт	**С, м/с**	Річна витрата, $м^3/с$
Рівнинні	великі	добре	гравій	**40 - 70**	>250
	середні	помірне	пісок, мул	**30 - 60**	25 – 250
	малі	слабке	пісок, мул	**30 - 50**	2,5 – 25
	струмки	помірне	пісок, мул	**10 - 30**	2,5
Гірські	середні	дуже добре	валуни	**20 - 35**	25
	малі	добре	галька	**15 - 30**	2,5 – 25
	струмки	добре	валуни	**10 –20**	2,5
Передгірні	середні	добре	галька, гравій, пісок	**20 - 40**	25 – 250

Послідовність розрахунку

1. Визначається умовна площина поперечного перерізу припливу стічних вод, виходячи з припущення, що швидкість стічних вод у потоці дорівнює швидкості самого потоку:

$$\delta = Q_{CT} \ / V_C . \qquad (2.56)$$

2. Розраховується ширина припливу стічних вод у початковому створі (ширина, на якій відбувається витиснення чистої води стічною водою з концентрацією домішки C_{CT}):

$$в = \delta / H_C . \qquad (2.57)$$

3. За величиною “в” визначається ширина розрахункового осередку Δz з урахуванням такої вимоги:

$$\Delta z = в/n; \quad n = 1, 2, \ldots; \quad \Delta z \le 0{,}1B_C . \qquad (2.58)$$

4. Розраховується довжина розрахункового осередку:

$$\Delta x = V_C \Delta z^2/(4D) . \qquad (2.59)$$

5. Визначається загальна кількість струменів по ширині потоку

$$N = B_C / \Delta z . \qquad (2.60)$$

6. Визначається кількість струменів (із загального N), у яких знаходиться стічна вода:

$$n = в / \Delta z . \qquad (2.61)$$

7. На розрахунковій області потоку розбивається сітка з осередками

Δx, Δz . У початковому створі в “n” клітинок, що відповідають місцю розташування скиду стічних вод, записується значення концентрації домішки у стічних водах ($C_{ст}$). В решту N-n осередків початкового створу записуються значення фонової концентрації (C_E) .

8. Розрахунок концентрації домішки в осередках наступного створу здійснюється за формулою (2.46) (рис. 2.6).

При розрахунках у межах потоку використовуються формули (2.50) чи (2.53).

Розрахувавши таким чином концентрації домішки в осередках другого створу, переходимо до наступного і т.д.

В усіх створах сума концентрацій домішки повинна бути постійною.

9. Якщо розміри клітин дуже малі, [11] то розрахунок виконується до створу, де приклади поширюються на 20-50 осередків. Після цього осередки об’єднуються по ? = 2, 3, … (новий крок Δz_2 по осі OZ дорівнює ? Δz_1), визначається новий крок Δx_2 = ?^{2} Δx_1 і розрахунок продовжується. При необхідності можна повторити збільшення кроку.

k k +1

m+1	$C_{k,m+1}$ — 1/4 →	↓	
m	$C_{k,m}$ — 1/2 →	$C_{k+1,m}$	
m-1	$C_{k,m-1}$ — 1/4 →	↑	
…			
2	$C_{k,2}$ — 1/4 →	↓	
1	$C_{k,1}$ — 3/4 →	$C_{k+1,1}$	

межа потоку (берег)

Рис. 2.6 – Схема розрахунку концентрацій забруднювальної речовини у наступному створі

2.4.3 Моделювання розповсюдження забруднювальних речовин при аварійних розливах (нестала дифузія)

<u>Вивід диференціального рівняння розповсюдження забруднювальних речовин у циліндричних координатах</u>

Уявимо, що стався аварійний розлив речовини об’ємом W_0. Середня глибина (H_C) на акваторії мала і витиснення чистої води стічною водою з концентрацією домішки C_O відбувається до дна водоєму (змінення концентрації речовини по глибині відсутнє).

Об’єм забруднення у товщі води уявимо у формі циліндра, тобто на поверхні води пляма має форму кола. Початок системи координат розташуємо в центрі плями незалежно від того, чи залишається пляма на місці чи переміщується під дією течії й вітру. Перенесення плями по акваторії відбувається за рахунок адвекції, а переміщення речовини в плямі – турбулентної дифузії.

Оцінка розповсюдження плями забруднення круглої форми при таких умовах найпростіше може бути виконана методом, заснованим на розв’язанні диференціального рівняння турбулентної дифузії у циліндричних координатах. При розливі речовини, що плаває на поверхні води (наприклад нафти), використовуються полярні координати.

Припустимо, що в середньому перенесення речовини в плямі відбувається рівномірно у всі боки від центра вздовж радіуса. Поперек радіуса результуючий перенос дорівнює нулю. У зв’язку з цим, концентрація речовини змінюється тільки вздовж радіусів, а на колах із центром у початку координат вона постійна.

Зроблене припущення правомочне, коли пульсації швидкості течії в потоці мають розподіл, близький до нормального, коефіцієнт турбулентної дифузії однаковий вздовж і поперек осередненого вектора швидкості течії, в межах плями швидкості течії в окремих точках незначно відрізняються одна від одної за величиною й напрямом.

Виділимо на плямі, яка розглядається, сектор [12] із кутом α (рис.2.9). На відстані r від центра концентрацію нафти і її похідну по радіусу позначимо C і $\partial C/\partial r$, а інтенсивність турбулентного переносу та його похідну – q та $\partial q/\partial r$.

З двох сторін від концентрації, яка розглядається, проведемо дуги з радіусами $r_1=(r-\Delta r/2)$ і $r_2=(r+\Delta r/2)$, довжина яких відповідно складе αr_1 і αr_2.

Поверхня, обмежена дугами й відрізками радіусів, буде мати площу, яка дорівнює $\Delta\omega = \alpha r\Delta r$, а об’єм у товщі води :

$$\Delta W = H_C \alpha r \Delta r.$$

Кількість речовини, яка надійшла у контрольний об’єм через першу поверхню (дугу) за час δt , виражається величиною:

$$m_1 = q_1 \Delta\omega_1 \delta t = q_1 H_C \alpha r_1 \delta t = q_1 H_C \alpha (r-\Delta r/2) \delta t. \qquad (2.63)$$

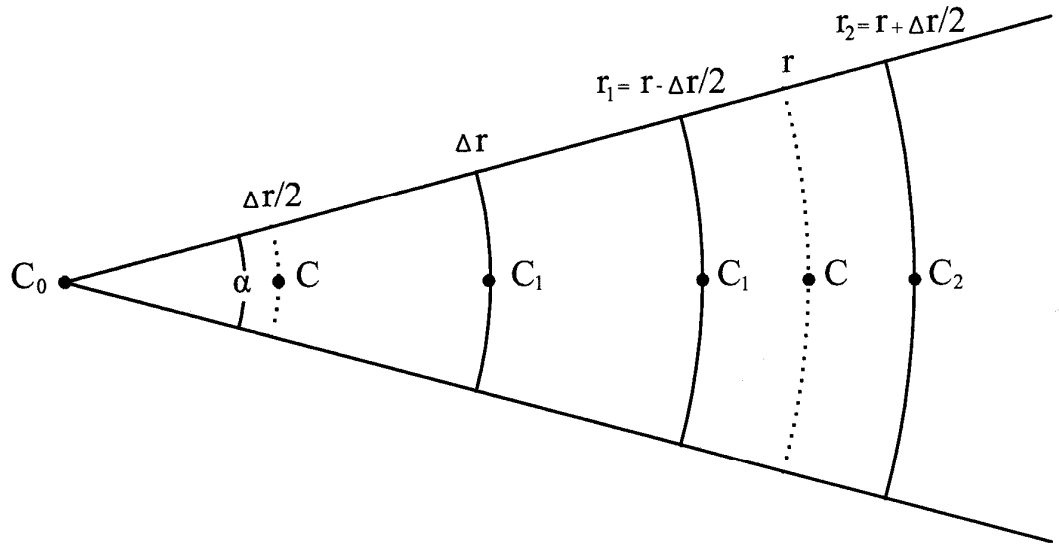


Рис. 2.9 - Схема до виводу диференціального рівняння

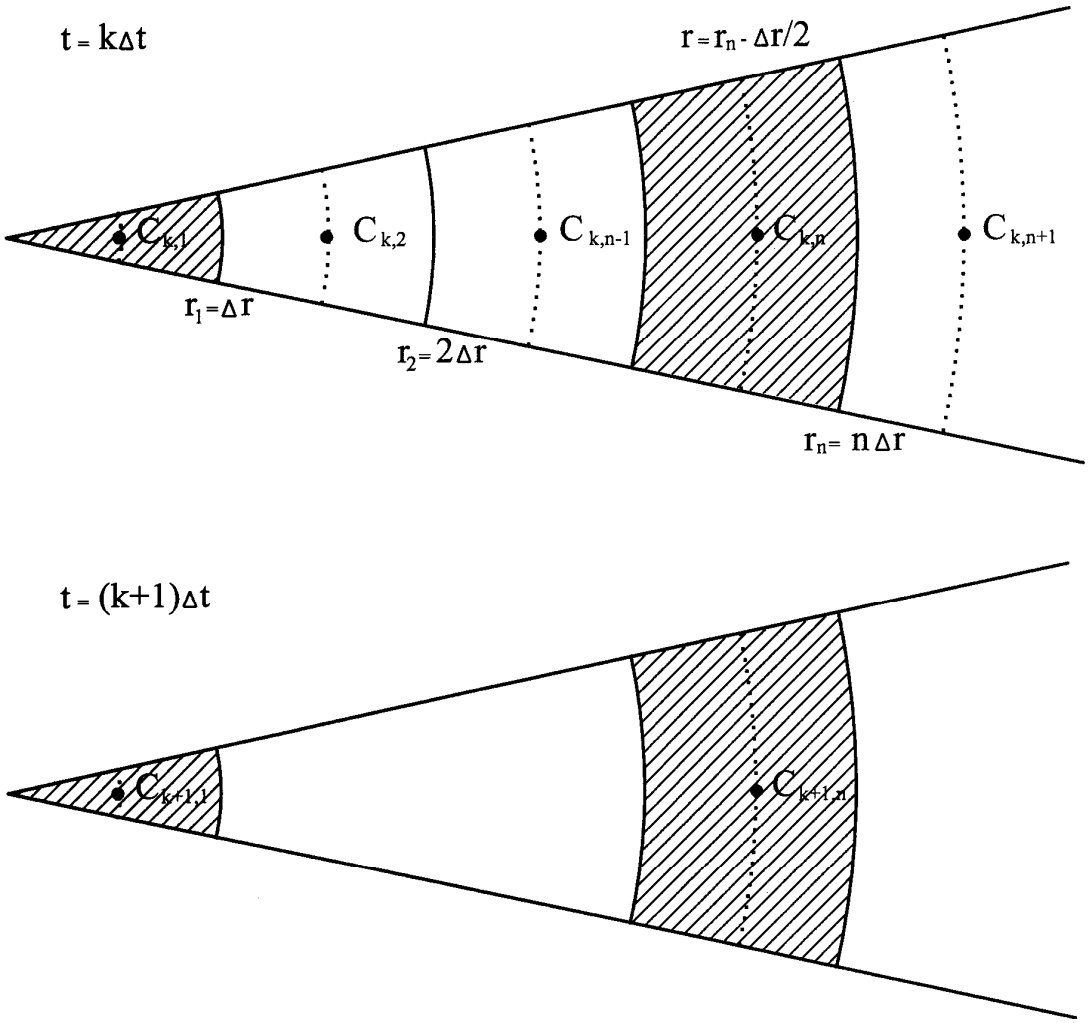


Рис. 2.10 - Схема до виводу розрахункової формули

За цей же час через другу поверхню (дугу) буде винесено

$$m_2 = q_2 H_C \alpha (r+\Delta r/2)\, \delta t. \qquad (2.64)$$

Зміна кількості речовини за рахунок її надходження через грань 1 і виносу через грань 2 дорівнює

$$\Delta m = m_1 - m_2 = H_C \alpha \delta t\, [q_1(r-\Delta r/2) - q_2(r+\Delta r/2)] =$$

$$= H_C \alpha \delta t\, [r(q_1 - q_2) - (q_1 + q_2)\Delta r/2]. \qquad (2.65)$$

Представим різницю і суму величин q_1 і q_2 у наступному вигляді:

$$q_1 - q_2 = -(\partial q/\partial r)\, \Delta r = -\partial/\partial r[-D(\partial C/\partial r)]\Delta r = D(\partial^2 C/\partial r^2)\Delta r,$$

$$(q_1 + q_2)/2 = q = -D(\partial C/\partial r).$$

Тоді формула (2.65) буде мати вигляд

$$\Delta m = H_C \alpha \delta t[rD(\partial^2 C/\partial r^2)\Delta r - (-D(\partial C/\partial r))\Delta r] =$$

$$= H_C \alpha r \Delta r \delta t[D(\partial^2 C/\partial r^2) + D(\partial C/\partial r)/r] =$$

$$\Delta W \delta t[D(\partial^2 C/\partial r^2) + D(\partial C/\partial r)/r]. \qquad (2.66)$$

Крім того, у контрольному об’ємі буде трансформовано $\Delta m_H = C k_H \Delta W \delta t$ речовини (де k_H - коефіцієнт неконсервативності, 1/сек). З врахуванням цого загальне зниження кількості речовини (Δm_O) в об’ємі буде дорівнювати

$$\Delta m_O = \Delta m + \Delta m_H = \Delta W \delta t[D(\partial^2 C/\partial r^2) + D/r\, (\partial C/\partial r) + C k_H]. \quad (2.67)$$

Процеси виносу, надходження й трансформації речовини визначають зміни її кількості за часом в контрольному об’ємі. Ці зміни можна подати у вигляді

$$\Delta m_O = \Delta W \delta t\, (\partial C/\partial t). \qquad (2.68)$$

Якщо ми праві частини рівнянь (2.67) і (2.68) розділимо на $\Delta W \delta t$, то одержимо:

$$\partial C/\partial t = D(\partial^2 C/\partial r^2) + D/r\, (\partial C/\partial r) + C k_H\,. \qquad (2.69)$$

Виведемо тепер диференціальне рівняння для контрольного майданчика, який примикає до центра плями й обмежений дугою з радіусом Δr (рис. 2.9). Його площа дорівнює $\Delta\omega = \alpha\,(\Delta r/2)\Delta r$.

Для ділянки, яка розглядається, характерні такі особливості: на ній спостерігається тільки винос речовини і в центрі $\partial C_0/\partial r=0$ (оскільки в усі боки від центра значення концентрацій зменшуються). Середній градієнт концентрацій на ділянці позначимо $\partial C/\partial r$, концентрацію речовини і градієнт концентрації на відстані Δr від центра - C_1 і $\partial C_1/\partial r$, а інтенсивність турбулентного переносу - q_1.

Зміна кількості речовини за рахунок її надходження через грань 0 і виносу через грань 1 дорівнює

$$\Delta m = m_O - m_1 = 0 - H_C\alpha\,\Delta r\delta t[q_1] = -\,H_C\alpha\,\Delta r\delta t[-D(\partial C_1/\partial r)] =$$

$$= H_C\alpha\,\Delta r\delta t[D(\partial/\partial r(C_O + (\partial C/\partial r)\Delta r))] = H_C\alpha\,\Delta r\delta t[D((\partial C_O/\partial r) + (\partial^2 C/\partial r^2)\Delta r)] =$$

$$= H_C\alpha\,\Delta r\delta t[D(0 + (\partial^2 C/\partial r^2)\Delta r)] = H_C\alpha\,\Delta r\Delta r\delta t[D(\partial^2 C/\partial r^2)] =$$

$$= 2\Delta W\delta t[D(\partial^2 C/\partial r^2)]. \qquad (2.70)$$

Враховуючи неконсервативність речовини, загальне зниження кількості речовини (Δm_O) в об’ємі буде дорівнювати

$$\Delta m_O = \Delta m + \Delta m_H = \Delta W\delta t[2D(\partial^2 C/\partial r^2) + Ck_H]. \qquad (2.71)$$

Зміни кількості речовини за часом в контрольному об’ємі можна подати у вигляді

$$\Delta m_O = \Delta W\delta t\,(\partial C/\partial t). \qquad (2.72)$$

Тоді з врахуванням (2.71) і (2.72) граничну умову можна буде записати так:

$$\partial C/\partial t\,\big|_{r\to 0} = 2D(\partial^2 C/\partial r^2) + Ck_H\,. \qquad (2.73)$$

Таким чином, модель розповсюдження речовини при аварійних розливах разом з граничними й початковими умовами буде записана у вигляді:

$$\partial C/\partial t = D(\partial^2 C/\partial r^2) + D/r\,(\partial C/\partial r) + Ck_H\,, \qquad (2.74)$$

$$\partial C/\partial t\,\big|_{r\to 0} = 2D(\partial^2 C/\partial r^2) + Ck_H\,,$$

$$C(t,r) = C_O\,, \qquad \text{при } t = 0 \text{ і } 0 < r \le r_O;$$

$$C(t,r) = C_E\,, \qquad \text{при } t = 0 \text{ і } r > r_O,$$

де C_O - концентрація речовини в початковий момент часу у плямі;
r_O - радіус плями в початковий момент часу.

Крім того, повинна виконуватись ще одна умова:

$$2\pi \int_0^{r_t} C(t,r)rdr = m_O \exp(k_H t), \qquad (2.75)$$

де r_t - радіус плями в момент часу t;
C(t,r) – концентрація речовини в момент часу t в плямі на відстані r від центра;
m_O - маса речовини в плямі в початковий момент часу.

У рівнянні (2.75) правий і лівий вирази позначають масу речовини у плямі в момент часу t.

Розв'язання диференціального рівняння

Скористуємось диференціальним рівнянням з граничними й початковими умовами (2.74) для виводу розрахункової формули, яка дозволить визначити значення концентрації речовини в плямі в різні моменти часу.

В деякий момент [11] часу $t=k\Delta t$ (де Δt - крок в часі) виділимо на плямі речовини сектор з кутом α, розіб'ємо його дугами з кроком Δr на відсіки (рис. 2.10), пронумеруємо ці відсіки, починаючи від центра n=1,2,3... Передбачимо, що середні концентрації речовини у відсіках спостерігаються на дугах, які проходять через середину відсіку. Середню концентрацію речовини в момент часу $t=k\Delta t$ в відсіку з номером n позначимо $C_{k,n}$. Вона буде спостерігатись на відстані $r_n=(2n-1)(\Delta r/2)$ від центра. Середні концентрації речовини у відсіках ліворуч і праворуч від відсіку, який розглядається, у той же момент часу позначимо $C_{k,n-1}$, і $C_{k,n}$, а концентрацію у відсіку n у подальший момент часу $t_{k+1}=(k+1)\Delta t$ позначимо $C_{k+1,n}$.

Основне рівняння (2.74) у формі кінцевих різниць:

$$\Delta C/\Delta t = D(\Delta^2 C/\Delta r^2) + (D/r)(\Delta C/\Delta r) + k_H C. \qquad (2.76)$$

Запишемо всі прирощення n в інші елементи, використовуючи прийняті позначення:

$$\Delta C/\Delta t = (C_{k+1,n} - C_{k,n})/\Delta t,$$

$$\Delta C/\Delta r = (C_{k,n+1} - C_{k,n-1})/(2\Delta r),$$

$$\Delta^2C/\Delta r^2 = [(\Delta C/\Delta r)_П - (\Delta C/\Delta r)_Л]/\Delta r =$$

$$= [(C_{k,n+1} - C_{k,n})/\Delta r - (C_{k,n} - C_{k,n-1})/\Delta r]/\Delta r =$$

$$= (C_{k,n+1} + C_{k,n-1} - 2C_{k,n})/\Delta r^2,$$

$$r = (n\Delta r - \Delta r/2) = \Delta r(n - 1/2) = \Delta r(2n - 1)/2,$$

де $(\Delta C/\Delta r)_П$ і $(\Delta C/\Delta r)_Л$ - прирощення концентрації на правій і лівій межах відсіку з номером n.

Підставивши ці вирази в формулу (2.76), розкривши дужки і вирішивши її відносно $C_{k+1,n}$, отримаємо:

$$C_{k+1,n} = (1 - 2a + k_Н\Delta t)C_{k,n} + a(bC_{k,n+1} + dC_{k,n-1}), \quad (2.77)$$

де $a=D\Delta t/\Delta r^2$; $b=2n/(2n-1)$; $d=2(n-1)/(2n-1)$.

Покажемо, що формула (2.77) справедлива і для першого відсіку (при n=1).

Для цього введемо такі позначення $C_{k,1}$ і $C_{k,2}$ - середні концентрації речовини в першому і в другому відсіках в момент часу t_k; $C_{k+1,1}$ - середня концентрація речовини в першому відсіку в момент часу t_{k+1}; $(\Delta C/\Delta r)_П$ і $(\Delta C/\Delta r)_Л$ - похідні на правій і лівій межах відсіку (нагадаємо, що в центрі $\Delta C/\Delta r=0$).

Подамо формулу (2.73) у формі кінцевих різностей:

$$(\Delta C/\Delta t)\big|_{r\to 0} = 2D(\Delta^2C/\Delta r^2) + k_НC. \quad (2.78)$$

Запишемо всі елементи формули (2.78), використовуючи прийняті позначення:

$$(\Delta C/\Delta t) = (C_{k+1,1} - C_{k,1})/\Delta t;$$

$$\Delta^2C/\Delta r^2 = [(\Delta C/\Delta r)_П - (\Delta C/\Delta r)_Л]/\Delta r = [(C_{k,2} - C_{k,1})/\Delta r - 0]/\Delta r =$$

$$= (C_{k,2} - C_{k,1})/\Delta r^2;$$

$$C = C_{k,1.}$$

Підставивши ці вирази в формулу (2.78) і вирішивши її відносно $C_{k+1,1}$, отримаємо:

$$C_{k+1,1} = (1 - 2a + k_H\Delta t)C_{k,1} + 2aC_{k,2} \ . \qquad (2.79)$$

Не важко здогадатися, що формула (2.77) легко перетворюється на формулу (2.79) при n=1, що і треба було довести.

Формулу (2.77) можна спростити, прийнявши a = 0,25 , тоді

$$C_{k+1,n} = (0,5 + k_H\Delta t)C_{k,n} + 0,25(bC_{k,n+1} + dC_{k,n-1}), \qquad (2.80)$$

за умови $\Delta t = \Delta r^2/(4D)$ і $\Delta t < 0,5/(-k_H)$.

При розливі консервативної речовини ($k_H = 0$) формула (2.80) буде мати вигляд:

$$C_{k+1,n} = 0,5C_{k,n} + 0,25(bC_{k,n+1} + dC_{k,n-1}). \qquad (2.81)$$

<u>Порядок розрахунку</u>

Для розрахунку переносу й дифузії забруднювальних речовин при їх аварийних розливах необхідні такі вихідні дані: об’єм розливу Wo; характеристика розкладання розлитої речовини k_H; початкова C_O і фонова C_E концентрація речовини; середня глибина на акваторії H_C; середня швидкість течії V_C (якщо вона є); коефіцієнт турбулентної дифузії D.

1. Визначається початковий радіус плями забруднення r_O, виходячи з припущення, що витиснення чистої води стічною водою з концентрацією домішки C_O відбувається до дна водойми :

$$r_O = \sqrt{Wo/\pi H_C} \ . \qquad (2.82)$$

2. За величиною r_O визначається ширина кілець Δr з урахуванням такої вимоги:

$$\Delta r = r_O/n_O; \quad n_O \geq 5. \qquad (2.83)$$

3. Розраховується крок у часі:

$$\Delta t = \Delta r^2/(4D) \ . \qquad (2.84)$$

4. В n_O перших кілець, починаючи від центра плями, записується початкова концентрація C_O. За формулою (2.80) розраховується концентрація речовини в наступний момент часу (через Δt). Розрахунок ведеться покроково від одного моменту часу до другого в межах усього розглядуваного періоду часу.

5. Якщо розміри кілець дуже малі, то розрахунок виконується до моменту часу, коли забруднення поширюється на 20-50 кілець. Після цього кільця об’єднуються по ?=2,3,… (нова ширина кілець Δr_2 дорівнює ?Δr_1). Концентрація осереднюється із врахуванням площі кілець

$$C_{2kj} = [\sum_{(j-1)?+1}^{j?} C_{1ki}(2i - 1)] / [\sum_{(j-1)?+1}^{j?} (2i -1)], \text{ при } j = 1, 2, ... n_k/?,$$

де C_{2kj} – концентрація в j-тому кільці, нова ширина якого Δr_2 в k-тий момент часу.

Визначається новий крок у часі $\Delta t_2 = ?^2 \Delta t_1$ і розрахунок продовжується. При необхідності збільшення можна повторити.

6. В усі моменти часу повинна виконуватися умова:

$$(1- k_H \Delta t)^k C_O n_O^2 = \sum_1^{n_k} C_{ki}(2i - 1),$$

де n_k – кількість кілець у плямі забруднення в k-тий момент часу.

<u>Приклад розрахунку</u>

Первинний розлив складає 450 м^3, середня глибина на акваторії – 3,2 м, D = 0,0031 м^2/сек, C_O = 120 мг/дм^3, C_E = 2 мг/дм^3.

<u>Рішення</u>

1. Радіус плями одразу після розливу дорівнює:

$$r_O = \sqrt{450/(3,2*3,14)} = 6,692 \text{ (м)}.$$

2. Тоді Δr приймаємо рівним (n_O = 2)

$$\Delta r = 6,692/2 = 3,346 \text{ (м)}.$$

Значення n_O = 2 відрізняється від рекомендованого раніше лише для зручності розрахунку у прикладі.

3. Крок у часі буде дорівнювати

$$\Delta t = 3,346^2/(4*0,0031) = 15,048 \text{ (мін)}.$$

Розрахунок дифузії плями забруднення наведений у таблицях 2.5 і 2.6:

$C_{1,2,2}$ = 0,5*66,6667 + 0,1667*100,0000 + 0,3333*20,0000 = 56,6693,

..... .

4. При збільшенні кроку у просторі маємо:

Δr_2 = 3,346 * 2 = 6,69 (м), $\Delta t = 2^2$ * 15,048 = 60,2 (мин.),

$C_{2,4,1}$ = (60,0021*1 + 44,7653*3)/(1+3) = 48,5745,

$C_{2,4,2}$ = (24,2867*5 + 9,0481*7)/(5 + 7) = 15,3975,

..... .

Таблиця 2.5 - Розрахунок дифузії плями забруднення (Δr_1=3,35 м, Δt_1=15,0 хв)

n	2n-1	0,25b	0,25d	$C_{1,k,n}$,%				
				k=0	1	2	3	4
1	1	0,5000	0	100,0000	100,0000	83,3333	70,0012	60,0021
2	3	0,3333	0,1667	100,0000	66,6667	56,6693	50,0031	44,7653
3	5	0,3000	0,2000	0	20,0000	23,3333	24,2863	24,2867
4	7	0,2857	0,2143	0	0	4,2860	7,1433	9,0481
5	9	0,2778	0,2222	0	0	0	0,9523	2,0633
6	11	0,2727	0,2273	0	0	0	0	0,2164
∑				400,0	400,0	400,0	400,0	400,0

Таблиця 2.6 - Розрахунок дифузії плями забруднення (Δr_2=6,69 м, Δt_2=60,16 хв)

n	2n-1	0,25b	0,25d	$C_{2k,n}$,%				
				k=4	5	6	7	8
1	1	0,5000	0,0000	48,5745	31,9860	24,0656	19,3356	16,1746
2	3	0,3333	0,1667	15,3975	16,1452	14,6056	13,0136	...
3	5	0,3000	0,2000	1,0475	3,6032	5,0979	...	...
4	7	0,2857	0,2143	0	0,2244	0,8843	...	...
5	9	0,2778	0,2222	0	0	0,0498	...	...
6	11	0,2727	0,2273	0	0	0	...	...
7	13	0,2692	0,2308	0	0	0	0	...
∑				100,0	100,0	100,0	100,0	100,0

2.5 Імітаційне моделювання (метод Монте-Карло)

2.5.1 Сутність методу, випадкові числа з рівномірним розподіленням

Метод Монте-Карло можна визначити, як чисельний метод рішення математичних задач за допомогою [13] моделювання випадкових чисел. Цей метод дозволяє моделювати будь-який процес, на протікання якого впливають випадкові фактори. Можна сказати, що процес імітується ЕОМ, тому таке моделювання іноді назвають імітаційним. Тут варто додати, що часто цей метод використовують і для рішення математичних задач, не

пов'язаних з будь-якими випадками, тоді штучно вигадують вірогідну модель, що дозволяє вирішити цю задачу.

Щоб зрозуміти, про що йде мова, розглянемо приклад. Припустимо, що нам необхідно обчислити площу плоскої фігури С. Межа фігури довільна і може бути задана графічно чи аналітично. Нехай ця фігура буде усередині одиничного квадрата. Виберемо усередині квадрата N випадкових точок, позначимо N′ число точок, що попали усередину С. Геометрично очевидно, що площа С приблизно дорівнює відношенню N′/N. Чим більше N, тим вища точність оцінки. Однак, точність оцінки залежить не тільки від кількості обраних точок, але і від способу вибору цих точок. Як, наприклад, фізично можна вибрати точки: повісити лист із розглянутою фігурою на стенд і стріляти в нього. Загальну кількість влучень у лист і кількість влучень у фігуру можна порахувати. Однак, у даному випадку ми не застраховані від значної похибки. Гарний стрілець всі N разів може влучити у фігуру С. Площа буде дорівнювати 1 (хоча це і не так). Значить, такий спосіб вибору точок нам не підходить. Неважко зрозуміти, що метод буде справедливий тільки тоді, коли випадкові точки будуть не просто випадковими, а рівномірно розподіленими на одиничнім квадраті. Тобто, ми повинні одержати випадкову величину на інтервалі [0 -1) із густиною імовірності, що дорівнює 1.

У чому полягають особливості методу Монте-Карло?

По-перше, у порівняльній простоті структури обчислювального алгоритму.

По-друге, у необхідності досить великої кількості випробувань для одержання надійної оцінки.

Оцінка точності (похибки) методу Монте-Карло [13] базується на центральній граничній теоремі теорії імовірностей, що гласить: сума N однакових незалежних випадкових величин з однаковим довільним законом розподілення приблизно має нормальне розподілення. Тобто, якщо у нас є випадкові величини $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \ldots \xi_N$ з математичним очікуванням “m“ і дисперсією b^2, то розподілення суми цих величин буде приблизно нормальним з параметрами $a = Nm$ і $\sigma^2 = Nb^2$. За правилом 3σ відомо, що

$$P\{Nm + 3\sigma < \sum_1^N \xi_i < Nm - 3\sigma\} \approx 0{,}997, \qquad (2.85)$$

чи

$$P\{m + 3b/\sqrt{N} < 1/N \sum_1^N \xi_i < m - 3b/\sqrt{N}\} \approx 0{,}997,$$

чи

$$P\{\left|(1/N \sum_1^N \xi_i) - m\right| < 3b/\sqrt{N}\} \approx 0{,}997. \qquad (2.86)$$

В останньому виразі знаходиться і спосіб визначення m, і оцінка похибки. З останнього виразу видно, що змоделювавши N випадкових величин і знайшовши їхню суму , ми одержимо оцінку “m”, що відрізняється від вірного значення не більше ніж на 3b /√ N. Очевидно, що зі зростанням N, ця похибка наближається до 0.

2.5.2 Одержання випадкових чисел

Виділяють три способи одержання випадкових величин [13]: таблиці випадкових чисел, генератори випадкових чисел і метод псевдовипадкових чисел.

а) Елементарним пристроєм, що дозволяє одержати таблицю випадкових чисел, є рулетка, тобто обертовий круг з десятьома рівними секторами, у кожнім з яких записано одну із десяти цифр. Найбільша з опублікованих таблиць містить 1000000 цифр.

Потрібно зазначити, що складання відповідної таблиці завдання не просте, оскільки зібрати ідеальний пристрій, який би видавав усі цифри з імовірністю 1/10 практично неможливо.

Тому складові таблиці ретельно перевіряються за допомогою тестів.

Таблиці випадкових чисел використовуються тільки при розрахунках вручну, тому що вони у пам'яті ЕОМ займають занадто багато місця.

б) Генератори випадкових чисел. Використовуються шуми електронних ламп. Якщо за деякий фіксований Δt час рівень шуму лампи перевищить заданий поріг парне число раз, записується 0, якщо непарне число раз – 1. Ці цифри записуються в розряди двійкового числа (в чарунку). У будь-який момент розрахунку можна звернутися до цієї чарунки й одержати число.

Цей метод також не вільний від недоліків: по-перше, необхідно постійно (епізодично) виконувати перевірки якості чисел, які виробляються, і , по-друге, неможливо повторити той же розрахунок.

в) Псевдовипадкові числа. Оскільки якість чисел перевіряється за допомогою тесту, то можна не цікавитися способом одержання цих чисел, аби вони задовольняли прийнятій системі тестів. Тому Нейманом (одним з авторів методу) було запропоновано розраховувати числа за формулою. Числа, що мають властивості випадкових чисел, але розраховуються за формулою, називають псевдовипадковими.

Найбільше поширення одержав метод відрахувань:

$$m_{к+1} = 5^{17}\, m_k \pmod{2^{40}}, \qquad (2.87)$$

$$\sigma_к = 2^{-40}\, m_k,$$

де $m_{к+1}$ – число, що дорівнює залишку від розподілу 5^{17} на 2^{-40} (цей залишок називається найменшим позитивним відрахуванням), - звідси і назва методу;

$\sigma_к$ - псевдовипадкове число, рівномірно розподіляється на інтервал [0 - 1).

Дані формули легко реалізувати на ЕОМ, працюючих з 40-розрядними числами. Для ЕОМ типу ЄС, де числа мають 31 розряд, запропонована формула

$$m_{к+1} = 5^{13}\, m_k \pmod{2^{31}}, \qquad (2.88)$$

$$\sigma_к = 2^{-31}\, m_k.$$

Переваги методу: текст програми займає мало місця, швидкість генерування числа така ж, як і швидкість роботи ЕОМ; будь-яка послідовність чисел може бути легко відтворена, потрібно усього лише раз перевірити якість такої послідовності. Недолік: оскільки кількість розрядів обмежена, то послідовність чисел періодична. Однак, цей період настільки великий, що перевершує практичні потреби. Переважна більшість розрахунків за методом Монте-Карло здійснюється з використанням псевдовипадкових чисел.

2.5.3 Перетворення випадкових величин

При розрахунках методом Монте-Карло необхідно дуже часто відтворювати випадкові числа з заданим законом розподілення. Для тієї мети перетворюють випадкові числа з рівномірним розподіленням у інтервалі [0 – 1).

<u>Дискретні випадкові величини</u>

Допустимо, нам необхідно одержати значення випадкової величини

$$\xi - \begin{pmatrix} X_1, X_2, X_3 \ldots X_n \\ P_1,\ P_2,\ P_3 \ldots P_n \end{pmatrix}.$$

Для цого [13] інтервал [0 - 1) розіб'ємо на "n" відрізків, довжини яких P_1, P_2, P_3, … P_n . Координати точок розподілення будуть дорівнювати P_1; (P_1+ +P_2); (P_1 +P_2 + P_3); …; (P_1 +P_2 + P_3 +… P_{n-1}). Отримані інтервали нумеруємо – 1, 2, 3 … n.... На цьому підготовка до розіграшу закінчується.

Розігрується число γ_i (псевдовипадкове), дивимося на який інтервал воно потрапило, тобто визначаємо номер інтервалу. За номером визначаємо значення величини ξ. Якщо ми проведемо велику кількість розіграшів і оцінимо P_i для кожного X_i, то вони будуть дуже наближені до заданих P_i.

<u>Безупинні випадкові величини</u>

<u>Метод обернених функцій</u>

Нам необхідно одержати значення ξ, розподіленого на інтервалі (а - в) із густиною p(x). Значення ξ можна знаходити [13] з рівняння:

$$\int_a^{\xi} p(X)\, dX = \gamma,$$

тобто, вибравши значення γ_i, необхідно розв'язати рівняння відносно ξ_i .

Приклад: експонентне розподілення

$$p(X) = ae^{-aX} \rightarrow \int_0^{\xi} ae^{-aX}\, dX = \gamma \rightarrow e^{-aX} \Big|_0^{\xi} = \gamma \rightarrow 1 - e^{-a\xi} = \gamma \rightarrow e^{-a\xi} = 1 - \gamma \rightarrow$$

$$a\xi = \ln(1-\gamma) \rightarrow \xi = (1/a)\ln(1-\gamma) \rightarrow \xi = -(1/a)\ln\gamma. \qquad (2.89)$$

Моделювання випадкової величини ξ з нормальним законом розподілення, параметри якого $a = 0$, $\sigma = 1$, можна виконувати за формулою

$$\xi = \sqrt{\ln \gamma_1 \cos 2\pi\gamma_2}\,. \qquad (2.90)$$

Перехід до довільних параметрів a і σ здійснюється за формулою

$$\eta = a + \sigma\,\xi,$$

де a - математичне очікування η;

σ – середньоквдратичне відхилення η.

$$P(\eta) = 1/(\sigma\sqrt{2\pi})\exp\{-(\eta-a)^2/(2\sigma^2)\}. \qquad (2.91)$$

Довільне розподілення

Представимо емпіричний [13] (теоретичний чи аналітичний) закон розподілу у вигляді графіка. Апроксимуємо його ламаною лінією. Точки сполучення відрізків прямої спроектуємо на осі координат:

$$(P_к;\, a_к) = (0;\, a_0),\ (P_1;\, a_1),\ (P_2;\, a_2)\ \ldots\ (1;\, a_n).$$

Розігрується γ_i ;визначається, на який відрізок $(P_{к-1};\ P_к)$ воно потрапило; визначаються відповідні $(a_{к-1};\ a_к)$; розраховується ξ_i за формулою

$$\xi_i = a_{к-1} + \gamma_i\,(a_к - a_{к-1}).$$

2.5.4 Приклад використання методу Монте-Карло: розрахунок системи масового обслуговування

Опис задачі. Розглянемо одну з найпростіших систем масового обслуговування. Ця система (порт) складається із однієї лінії (причалу), що

може «обслуговувати споживачів». У систему надходять заявки (судна), причому моменти їхнього надходження випадкові. Якщо в момент надходження і-ої заявки (назвемо його $T_З$) ліния вільна, то вона приступає до обслуговування заявки, що продовжується $\Delta t_{ОБ}$ хвилин ($\Delta t_{ОБ}$ – час зайнятості лінії (тривалість обслуговування), величина випадкова). Якщо в момент часу $T_З$ лінія зайнята, то система видає відмовлення. Потрібно визначити, скільки (у середньому) заявок обслуговує система за час Т (це може бути 1 рік чи якийсь інший звітний період) і скільки відмовлень вона дасть.

Для отримання результату з необхідним ступенем точності необхідно відтворити на ЕОМ кілька реалізацій процесу обслуговування заявок з достатньою тривалістю.

Задачі такого типу зустрічаються при дослідженні організації роботи будь-яких підприємств. У деяких окремих випадках удається знайти аналітичні рішення. Однак у складних випадках метод Монте-Карло виявляється єдиним методом розрахунку.

<u>Найпростіший потік заявок.</u> Вивчення потоків заявок у реальніх умовах дозволило [13] виділити деякі випадки, що досить часто зустрічаються. Зупинимося на одному з них: найпростішому потоці.

Найпростішим потоком (чи потоком Пуассона) називається такий потік заявок, коли проміжок часу τ між двома послідовними заявками являє собою випадкову величину, розподілену в інтервалі (0 - ∞) із густістю

$$p(X) = ae^{-aX}. \qquad (2.92)$$

Цей закон розподілу називають також експонентним розподілом. Легко обчислити математичне очікування:

$$M\tau = \int_0^\infty X\, p(X)\, dX = \int_0^\infty X\, ae^{-aX} dX.$$

Після інтегрування вроздріб ($u = x$, $dv = ae^{-ax}dx$) одержимо

$$M\tau = -\, Xe^{-aX}\Big|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-aX}dX = -\,(1/a)e^{-aX}dX\Big|_0^\infty = 1/a, \qquad (2.93)$$

де а - густість потоку заявок.

Таке представлення потоку заявок через особливості експонентного розподілення дозволяє вирішити розглядувану задачу і багато подібних їй (навіть більш складних) аналітично. Однак, уже при довільному розподіленні інтервалів часу τ між заявками рішення цієї простої задачі може бути отримане тільки методом Монте-Карло.

На практиці часто доводиться розглядати більш складні системи: з n каналами, з чеканням у черзі і з відмовленнями устаткування. У цих випадках існуючі аналітичні рішення для більш простих задач використовуються при налагодженні складних алгоритмів розрахунків.

Схема розрахунку. Для початку приймемо деякі позначення:

$T_З$ і $T_{ЗВ}$ – моменти надходження заявки і звільнення каналу;

$\Delta t_З$ і $\Delta t_{ОБ}$ – тривалість періоду часу між надходженням (i-1) і i-ої заявками і часу обслуговування i-ої заявки (випадкові величини з експонентним розподіленням);

$a_З$ і $a_{ОБ}$ – параметри розподілу потоків заявок і обслуговування;

$N_{ОБ}$ і $N_{ВІД}$ – кількість заявок, що надійшли, і відмовлень;

j – кількість відтворених реалізацій;

N і T – необхідна кількість реалізацій і їхня тривалість.

Блок-схему алгоритму розрахунку показано на рис. 2.11.

Розрахунок починається з уведення даних: потрібної кількості реалізацій (N) і їхньої тривалості (T), а також параметрів законів розподілу інтервалів часу між надходженням заявок ($a_З$) і тривалості обслуговування ($a_{ОБ}$).

Далі обнуляются загальна кількість обслуговуваних заявок, загальна кількість відмовлень і поточна кількість реалізацій.

На початку реалізації вважаємо, що перша заявка надходить через інтервал часу, який дорівнює середньому значенню, тоді момент її надходження буде дорівнювати $T_З = 0 + 1/a_З$. При цьому $T_{ЗВ} = 0$.

У цей час реалізація ще не закінчилась і канал вільний. Розігрується час обслуговування $\Delta t_{ОБ}$, і визначається момент закінчення обслуговування: $T_{ЗВ} = T_З + \Delta t_{ОБ} = 1/a_З + \Delta t_{ОБ}$. Кількість обслугованих заявок збільшується на одиницю: $N_{ОБ} = N_{ОБ} + 1 = 0 + 1$. Потім розігрується інтервал часу до надходження наступної заявки $\Delta t_З$, і розраховується момент її надходження: $T_З = T_З + \Delta t_З = 1/a_З + \Delta t_З$. Далі цикл повторюється.

Необхідно нагадати, що тут значок «=» позначає оператор присвоєння, тобто запис $N_{ОБ} = N_{ОБ} + 1$ позначає наступне: до старого значення змінної $N_{ОБ}$ додається 1 і цій змінній привласнюється нове значення, збільшене на 1 (відбувається накопичення). Те саме стосується і змінних $T_З$, $T_{ЗВ}$ і всіх інших.

Припустимо, що обслуговано вже багато заявок і надходить наступна в момент $T_З$. Тоді необхідно перевірити: чи закінчилася реалізація? Це встановлюється (див. рис. 2.11) шляхом порівняння $T_З$ із заданою тривалістю реалізації T: якщо $T_З$ більше чи дорівнює T – реалізація закінчилася, якщо менше – ні.

Якщо реалізація продовжується, то здійснюється перевірка зайнятості каналу шляхом зіставлення моменту надходження заявки $T_З$ із

моментом його звільнення $T_{ЗВ}$: якщо $T_{ЗВ}$ менше або дорівнює $T_З$, то канал вільний; якщо більше – зайнятий.

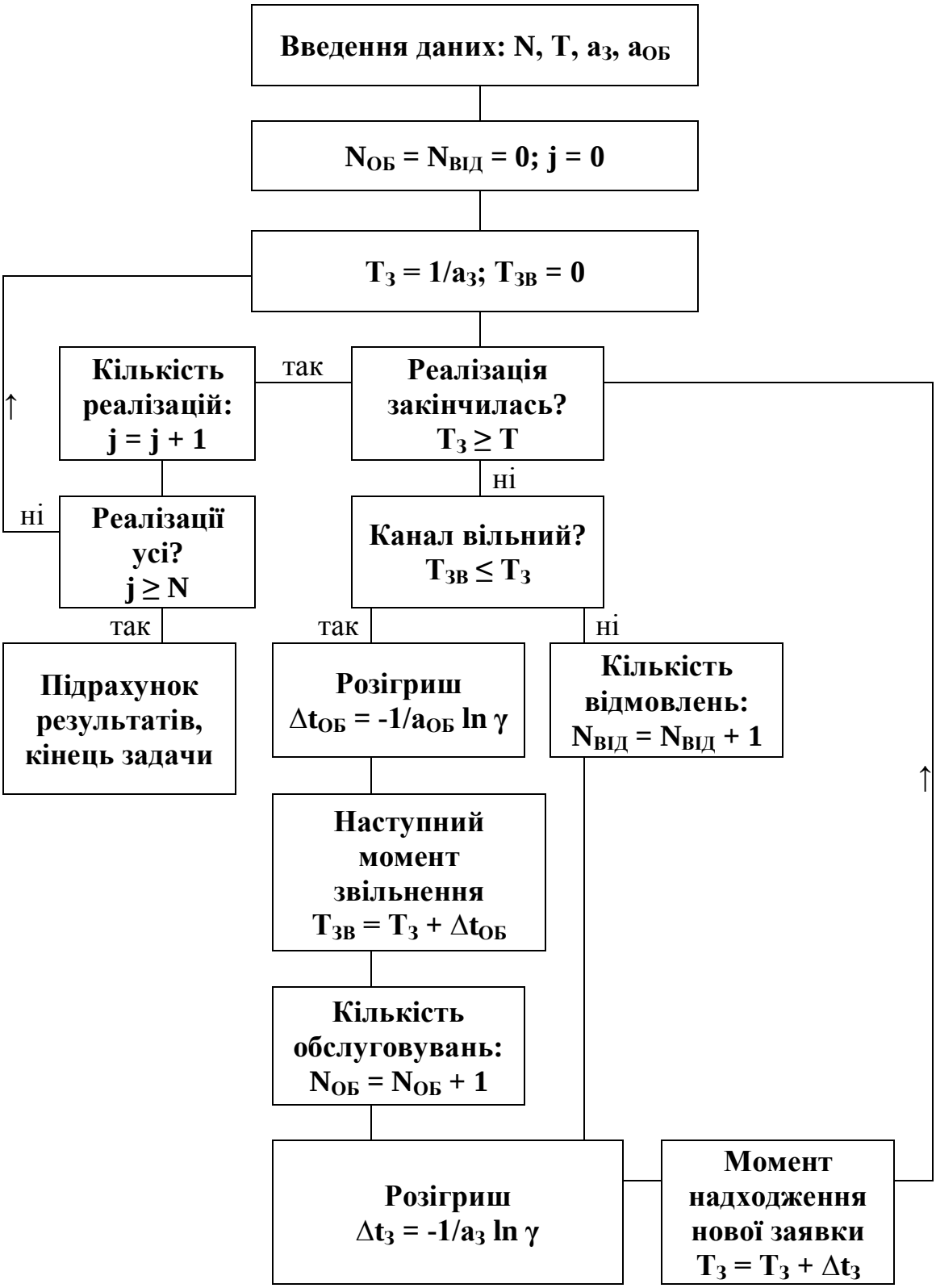


Рис. 2.11 – Блок-схема алгоритму розрахунку

Канал зайнятий: кількість відмовлень $N_{ВІД}$ збільшується на 1; розраховується $\Delta t_З$ до наступної заявки по формулі (2.89); визначається момент надходження цієї заявки $T_З$ і цикл повторюється.

Канал вільний: нова заявка встановлюється до причалу; розраховується її $\Delta t_{ОБ}$ по формулі (2.89); визначається момент звільнення каналу $T_{ЗВ}$; кількість обслуговувань $N_{ОБ}$ збільшується на 1; розігрується $\Delta t_З$ до наступної заявки по формулі (2.89); визначається момент надходження цієї заявки і цикл повторюється.

Якщо реалізація закінчена, то кількість реалізацій j збільшується на одиницю, і виконується перевірка: чи всі реалізації відтворені? Це встановлюється шляхом зіставлення j і N: якщо j більше або дорівнює N – реалізації відтворені усі; якщо менше – ні.

Якщо не всі реалізації виконані, здійснюється перехід до нової реалізації, при цьому $T_{ЗВ}$ обнуляється, а $T_З$ привласнюється значення $1/a_З$. Після цього відтворюється (імітується) нова реалізація.

Реалізації відтворені всі, виконується підрахунок результатів моделювання за формулами:

$$n_{ОБ} = N_{ОБ} / N \quad і \quad n_{ВІД} = N_{ВІД} / N, \qquad (2.94)$$

де $n_{ОБ}$ і $n_{ВІД}$ – середня кількість обслугованих заявок і середня кількість відмовлень за час T.

Формули (2.94) справедливі, оскільки в чарунках $N_{ОБ}$ і $N_{ВІД}$ накопичувалася кількість обслуговувань і відмовлень по всіх реалізаціях.

При довільному розподілі $\Delta t_З$ і $\Delta t_{ОБ}$ у блоках розіграшу цих величин необхідно організувати відповідний алгоритм розрахунку (див. п. 2.5.3).

Запропонована модель дозволяє при заданому потоці заявок оптимально збалансувати доходи підприємства з витратами на обслуговуюче устаткування. Оскільки, при збільшенні витрат на устаткування збільшується його продуктивність, при цьому зменшується час обслуговування, а з ним зменшується і кількість відмовлень.

Питання для самоперевірки

1. Що таке математична модель?
2. У чому полягає математичне моделювання та яка його мета?
3. Назвіть етапи математичного моделювання.
4. Що таке наближені числа і як оцінюється їх точність?
5. Які існують форми подачі наближених чисел?
6. Що таке абсолютна та відносна похибки і як вони визначаються?
7. Що таке гранична похибка?
8. Назвіть п’ять правил оцінки похибок при операціях з наближеними числами.
9. У чому полягає підбір емпіричних формул?

10. Як визначаються параметри емпіричних залежностей?
11. Які основні характеристики рядів розраховують при статистичній обробці емпіричних даних?
12. Як виконується розрахунок параметрів рівняння регресії?
13. Що таке коефіцієнт кореляції? Чому він дорівнює при наявності прямолінійної залежності?
14. У чому полягає сутність методу найменших квадратів?
15. Як виконується побудова режимної функції висоти хвиль?
16. Що характеризують режимна і системна забезпеченість хвилювання?
17. Як виконується вирівнювання параболічної, гіперболічної та показникової залежностей?
18. У чому полягає сутність виводу диференціальних рівнянь локальним та об'єктним способами?
19. Навести формули поодинокої витрати речовини при адвекції, турбулентній дифузії та осадженні.
20. Навести розрахункову формулу турбулентної дифузії речовини за наявності бокових припливів.
21. Навести розрахункову формулу турбулентної дифузії речовини у циліндричних координатах.
22. Записати модель перенесення речовини у потоці (плоска задача) і навести послідовність розрахунку.
23. Як ураховується неконсервативність речовини у водному середовищі?
24. Запишіть рівняння турбулентної дифузії для плоскої постановки задачі.
25. Як задається сітка на розрахунковій області потоку?
26. Запишіть розрахункову формулу для плоскої постановки задачі, за яких умов вона виконується?
27. Які дані необхідні для розрахунку розводження стічних вод?
28. Як визначається умовна площа поперечного перетину й ширина припливу стічних вод?
29. Виходячи з яких умов визначається розмір осередків?
30. Як виконується розрахунок біля берегів?
31. Як збільшуються розміри розрахункової сітки розводження стічних вод?
32. У чому полягає сутність методу Монте-Карло?
33. Які випадкові числа необхідні для імітаційного моделювання?
34. Які існують методи задля отримання випадкових чисел?
35. У чому полягає сутність методу обернених функцій?
36. Як можна отримати довільне розподілення?
37. Основні положення моделювання системи масового обслуговування.

3 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗ МІГРАЦІЇ ЗАБРУДНЮВАЧІВ У ҐРУНТОВОМУ ТА РОСЛИННОМУ СЕРЕДОВИЩІ

3.1 Моделювання основних процесів життєдіяльності рослин

Сучасні уявлення про процес формування продуктивності агроекосистем стали основою для створення моделей продуктивності посівів різної складності. Розвиток теоретичних та експериментальних робіт по вивченню міграції полютантів в грунтовому покриві, потрапляння їх в рослини кореневим та аеральним шляхом дозволило почати розробку комплексних моделей формування врожайності сільськогосподарських культур, які синтезують опис впливу як гідрометеорологічного режиму, так і антропогенного забруднення на формування кількості, якості та екологічної чистоти врожаю, у тому числі і в посушливій зоні.

В результаті викидів промислових підприємств в атмосферу різних забруднювальних речовин відбувається антропогенне забруднення як атмосфери так і грунту. Крім того, забруднювальні елементи входять у склад мінеральних добавок які вносяться під сільськогосподарські культури, а також вода яка використовується з ціллю зрошення має низьку якість і вміщує у собі радіонукліди та важкі метали.

Для урахування комплексу цих факторів необхідно використовувати математичні моделі які з достатнім ступенем вірогідності можуть описувати вказані процеси.

При розробці моделі виходять з такої концепції:

– продуктивність рослин визначається розвитком рослин та інтенсивністю ростових процесів в різних умовах зовнішнього середовища

– розвиток невід'ємний від процесів росту. Ріст та розвиток моделюються нерозривно в комплексі та в залежності від режиму факторів зовнішнього середовища, а особливо екстремальних, та біологічних властивостей рослин;

– моделюється кореневе та аеральне засвоєння полютантів: радіонуклідів, тяжких металів, сірки, пестицидів;

– якість та екологічна чистота врожаю формуються під впливом ендогенних та екзогенних факторів на протязі всього періоду вегетативного та репродуктивного росту рослин.

Процес формування кількості, якості та екологічної чистоти врожаю розглядається як складна сукупність синтезу, розпаду та взаємоперетворення основних компонентів біомаси, накопичення рослиною забруднювальних речовин.

Під кількістю врожаю розуміється накопичення сухої біомаси господарсько-цінної частини врожаю – зерна, під якістю – вміст у зерні білка та крохмалю, під екологічною чистотою – вміст у зерні радіонуклідів та тяжких металів.

Блок вхідної інформації включає дані про середню декадну температуру повітря, довготривалість сонячного сяяння, дефіцит вологості грунту, суму опадів, площу листової поверхні рослин.

Блок радіаційного та водно-теплового режимів рослинного покриву включає до себе дані про найменшу вологоємність грунту, оптимальні суми температур для росту рослин.

Блок фотосинтезу включає оптимальні суми температур для фотосинтезу окремих органів рослин, коефіцієнти інтенсивності фотосинтезу та початковий уклон світлової кривої фотосинтезу.

Блок дихання включає коефіцієнти витрат на дихання росту та підтримку структур.

Блок росту та розвитку включає вплив факторів навколишнього середовища на швидкість накопичення рослинної маси та враховує вплив процесів забруднення на рослинну масу. Перейдемо до більш детального описування блоків моделі. Сонячна радіація є основним екологічним фактором, який визначає будь-який процес, який відбувається у природі.

Енергія сонця є первинним джерелом усіх біофізичних та фізіологічних процесів, які проходять у системі грунт-рослина-атмосфера. Внаслідок проходження скрізь атмосферу та відбиваючись від підстильної поверхні сонячна радіація зазнає зміни. Частина сонячної радіації поглинається в атмосфері та перетворюється в інші види енергії, головним чином, в теплову. Частина її розсіюється в атмосфері молекулами газів, аерозолями та хмарами.

Головна роль у формуванні врожаю сільськогосподарських культур належить фотосинтезу листя. Для розрахунку інтенсивності фотосинтезу посіву картоплі в розрахунковій декаді використовується формула:

$$\Phi_0^j = kbI_{п.Ф}^j/(k + bI_{п.Ф}^j), \qquad (3.1)$$

де Φ_0 – інтенсивність фотосинтезу при оптимальних умовах тепло- та вологозабезпеченості та реальних умовах освітленості, мг $CO_2 \cdot дм^{-2} \cdot г^{-1}$;

k = 28 інтенсивність фотосинтезу при світловій насиченості та нормальній концентрації CO_2, мг $CO_2 \cdot дм^{-2} \cdot г^{-1}$;

b = 300 – початкової уклон світлової кривої, мг $CO_2 \cdot дм^{-2} \cdot г^{-1}$(кал $см^{-2} \cdot хв.^{-1}$);

$I_{п.Ф}$ – ФАР, що поглинається посівом, кал $\cdot см^{-2} \cdot хв.^{-1}$;

j – номер розрахункової декади.

Як відомо, в основі теорії продуційного процесу сільськогосподарських культур становить вивчення та описання процесу фотосинтезу рослин, тобто утворення вуглеводів у фотосинтезуючих органах з води та двоокису вуглецю під дією ряду факторів, основним з яких є інтенсивність ФАР в рослинному покриві.

По мірі проникнення ФАР у глибінь рослинного покриву проходить зниження її інтенсивності в залежності від цілого ряду різних параметрів: висоти рослинного покриву, кутової орієнтації листя, розподілу щільності рослинного покриву за вертикаллю, товщини та форми листя. Детальній опис процесу трансформації ФАР у посіві є складною математичною задачею, яка потребує урахування особливостей поглинання, розсіювання та відображення радіації у посіві, а також зміни її спектрального складу.

Найбільш простим та розповсюдженим методом, який характеризує послаблення ФАР рослинним покривом є формула Будаговського, згідно з якою середня інтенсивність фотосинтетично активної радіації у посіві визначається розвиненістю листового апарату рослин, тобто відносною площею листової поверхні (листовим індексом).

ФАР, яка поглинається посівом, в розрахунковій декаді розраховується за формулою:

$$I^{j}_{п.Ф} = I^{j}_{0}/(1 + cL^{j}), \qquad (3.2)$$

де I_0 – інтенсивність ФАР на верхній межі посіву в розрахунковій декаді, кал $\cdot$см$^{-2}\cdot$хв$^{-1}$;

c = 0,5 – емпірична постійна;

L – площа листової поверхні в розрахунковій декаді, м^2 $\cdot$м$^{-2}$. Потік ФАР на верхню межу посіву визначається за формулою:

$$I^{j}_{0} = 0{,}5Q^{j}/60\tau_{Д}, \qquad (3.3)$$

де Q – сумарна сонячна радіація, кал $\cdot$см$^{-2}\cdot$доб$^{-1}$;

$\tau_Д$ – середня тривалість дня в розрахунковій декаді, г.

Сумарна сонячна радіація розраховується за формулою Сивкова

$$Q^{j} = 12{,}66(S^{j})^{1,31} + 315(\sin h^{j}_{п})^{2,1}, \qquad (3.4)$$

де S – середня тривалість сонячного сяяння в розрахунковій декаді, г;

$h_п$ – полуденна висота Сонця, яка визначається за формулою:

$$\sin h^{j}_{п} = A^{j} + B^{j}, \qquad (3.5)$$

де A = sinφ sin δ; B = cos φ cosδ ; φ географічна широта станції;

δ – схил Сонця.

Таблиця схилень Сонця для весняних та літніх місяців апроксимована поліномом:

$$\delta = \left[0{,}473(t_0 + j) - 0{,}196 \cdot 10^{-2}(t_0 + j) - 0{,}407 \cdot 10^{-5}(t_0 + j)^3 - 0{,}616\right] \cdot 0{,}017453, \quad (3.6)$$

де t_0 – кількість днів від 20 березня до дня появлення сходів;

j – номер дня розрахункового періоду (тільки для цієї формули).

Інтенсивність фотосинтезу в реальних умовах середовища, які відрізняються від біологічно оптимальних, визначається за формулою:

$$\Phi_\tau^j = \Phi_0^j \alpha_\Phi^j \psi_\Phi^j \gamma_\Phi^j, \quad (3.7)$$

де Φ_τ – інтенсивність фотосинтезу в реальних умовах середовища, мг $CO_2 \cdot дм^{-2} \cdot г^{-1}$;

$\alpha_ф$ – онтогенетична крива фотосинтезу, відносні одиниці;

ψ_Φ, γ_Φ – функції впливу температури повітря та вологості грунту на фотосинтез.

Сумарний фотосинтез посіву за світлий час доби розраховується за формулою:

$$\Phi^j = 0{,}1\varepsilon, \; {}_\tau^j L^j \tau_Д^j, \quad (3.8)$$

де Ф – денний фотосинтез рослин на одиницю площі, $г \cdot м^{-2} \cdot доб.^{-1}$;

ε = 0,68 – коефіцієнт ефективності фотосинтезу;

L – площа листової поверхні, $м^2/м^{-2}$;

$\tau_Д$ – середня тривалість дня у розрахунковій декаді, г.

Добовий приріст сухої біомаси посіву в розрахунковій декаді ΔM ($г \cdot м^{-2} \cdot доб^{-1}$) визначається сумою денного фотосинтезу посіву та переміщення сухих речовин:

$$\Delta M^j = (\Phi^j + \Delta m_c^j) - \alpha_R^j (c_1 M^j + c_2 \Phi^j), \quad (3.9)$$

де α_R – онтогенетична крива дихання, яка розраховується аналогічно до кривої фотосинтезу, тільки з урахуванням оптимальної температури $t_{l\,opt}$ для сезонного ходу дихання;

M – суха біомаса посіву на початок розрахункової декади, $г \cdot м^{-2}$

c_1 = 0,01 – коефіцієнт, який характеризує витрати на підтримку структури, $г \cdot г^{-1} \cdot доб.^{-1}$;

c_2 = 0,255 – коефіцієнт дихання росту, безрозмірний.

3.2 Моделювання міграції радіонуклідів в агроценозах

3.2.1 Системний підхід у вивченні процесів міграції радіонуклідів в агроценозах

В останні три десятиліття в екологічних дослідженнях широке поширення одержав системний підхід, розроблений спочатку стосовно до технічних об'єктів [23]. Стосовно екологічних, біологічних та фізико-хімічних систем його можна сформулювати як підхід, створений на використанні сукупності наукових напрямків, об'єднаних загальною методологією дослідження якого-небудь явища (об'єкта) на основі визнання його цілісності і необхідності враховувати при його вивченні всю складність зв'язків між елементами системи, що описує дане явище (об'єкт). Очевидно, що така точка зору є найбільш доцільною і у радіоекологічних дослідженнях, оскільки при цьому потрібно об'єднання зусиль як екологів, біологів, так і хіміків, фізиків, математиків.

На підставі загальних екологічних концепцій [24] системне дослідження міграції радіонуклідів в агроценозах можна розділити на ряд етапів, які виконуються послідовно чи паралельно: постановка задачі, визначення структури моделюємої системи, ідентифікація моделі, реалізація моделі, перевірка моделі, дослідження моделі, використання моделі для рішення практичних задач, оцінка можливості застосування моделі для інших цілей.

1-й етап. *Постановка задачі*. Агроценози, так само як і їхні компоненти (ґрунти, рослини, популяції тварин), відносяться до досить складних природних об'єктів, внаслідок чого опис міграції в них радіонуклідів викликає певні труднощі. Однак і в цьому випадку можна виділити необхідну кількість характеристик, що найбільш істотні з погляду вивчення міграції. Основне призначення цього етапу – уточнення можливих аспектів дослідження транспорту радіонуклідів в агроценозах з врахуванням тільки тих властивостей, що визначають цей процес.

2-й етап. *Визначення структури системи.* Виходячи з постановки задачі, на цьому етапі дається опис розглянутих об'єкта і процесу, оцінюються їхні просторові та тимчасові границі. Виявляються найбільш істотні внутрішні і зовнішні перемінні системи, а також зв'язки між ними. Задачею етапу є узагальнення існуючих знань та уявлень про протікання міграції радіонуклідів в агроценозах у вигляді досить повної і несуперечливої концептуальної моделі.

3-й етап. *Ідентифікація моделі*. Метою цього етапу є встановлення математичних співвідношень, що зв'язують виділені перемінні, а також кількісна оцінка параметрів, що входять у ці співвідношення. Дуже часто основу моделей міграції складають балансові рівняння, що описують обмін радіонуклідів між різними компонентами агроценозів. Система таких рівнянь доповнюється набором необхідних емпіричних і напівемпіричних залежностей. При ідентифікації моделей, як правило, виникає необхідність у

проведенні натурних чи лабораторних експериментів з метою перевірки теоретичних уявлень про характер зв'язків між перемінними моделі або для одержання кількісних оцінок параметрів.

4-й етап. *Реалізація моделі.* Після ідентифікації моделі вона реалізується в аналітичній формі або у вигляді програми для ПЕОМ.

5-й етап. *Перевірка моделі.* На цьому етапі необхідно оцінити, наскільки адекватно модель може відтворювати реально процеси, які розглядаються. Найбільш часто для цього проводиться порівняння розрахункових і емпіричних даних про вміст радіонуклідів у різних компонентах агроценозів у відповідні моменти часу.

Для оцінки узгодження модельних і експериментальних даних використовуються різні статистичні критерії. У випадку їхнього невиконання необхідно повернутися до початкових етапів, після чого всі етапи послідовно варто повторити.

6-й етап. *Дослідження моделі.* Аналіз математичних моделей міграції радіонуклідів в агроценозах, як правило, зводиться до вивчення залежності вихідних параметрів моделі (звичайний вміст радіонуклідів в одному з компонентів агроценозу) від зовнішніх факторів, структури моделі та значень параметрів. З цією метою застосовуються методи технічної кібернетики, що одержали назву методів аналізу чутливості. Їхнє використання дозволяє виділити зв'язки між перемінними, параметри, а також зовнішні фактори, які чинять вирішальний вплив на отримані результати. Після цього уточнюється список параметрів, які необхідно визначити з високим ступенем точності, а також ті параметри, які можна оцінити приблизно.

Крім того, подібний аналіз, а також імітація за допомогою моделі різних ситуацій, у тому числі екстремальних, служать додатковим матеріалом для перевірки моделі і можуть призвести до необхідності її удосконалення.

7-й етап. На цьому етапі модель використовується для *вирішення тих практичних і наукових задач*, для яких вона створювалася. Серед них можна виділити прогноз забруднення продукції агропромислового виробництва, оцінку ефективності заходів, які проводяться з метою зниження надходження радіонуклідів у раціон харчування людини, а також різного роду задачі оптимізації. При проведенні зазначених розрахунків часто виявляються нові проблеми, вирішення яких можливе за допомогою моделі. Однак при цьому на підставі даних, отриманих при її дослідженні, варто оцінити, наскільки адекватно нові задачі відповідають реальним можливостям моделі, які передбачається використовувати.

Математичне моделювання при системному підході служить основним засобом організації досліджень, дозволяє виділити істотні сторони досліджуваного явища і виразити отриманий наближений опис у вигляді системи математичних виразів (моделі), які імітують з визначеним ступенем точності поводження реальної системи [21].

Важливою особливістю системного підходу є його інтеративність. Так, при перевірці чи дослідженні моделі встановлюється її відповідність явищу,

що спостерігається, після чого, у випадку невідповідності, її теоретичний опис удосконалюється. Розвиток математичного опису явища у свою чергу вимагає посилення і поглиблення експериментальних досліджень, що дозволяє організувати комплексні дослідження за принципом динамічної взаємодії моделі та експерименту.

В залежності від форми реалізації математичні моделі міграції радіонуклідів в агроценозах можна розділити на імітаційні та аналітичні

Під імітаційними моделями звичайно розуміють "формалізований опис в ПЕОМ досліджуваного явища у всій його повноті на грані нашого розуміння"

У випадку, якщо модель можна поставити у відповідність з аналітичним виразом, що дозволяє для будь-яких вхідних перемінних та початкових умов визначити шукані величини в будь-який момент часу, її називають аналітичною [25]. Такі моделі звичайно призначені для опису процесів при яких-небудь фіксованих координатах. На них часто проводять уточнення необхідних для опису міграції параметрів і оцінку їхніх величин. Значення аналітичних моделей визначається також і тим, що вони дають досить прості формули для наближених практичних розрахунків і часто бувають методичною основою для створення великих імітаційних моделей.

В залежності від ступеня визначеності результатів як імітаційні, так і аналітичні моделі поділяють на детерміновані і стохастичні. При цьому, якщо в детермінованих моделях значення перемінних визначаються точно, то стохастичні моделі оперують з розподілами параметрів. У цьому випадку вони розглядаються як випадкові величини і характеризуються ймовірними показниками, такими, як математичні чекання, дисперсія і т. п. Точкові і просторово розподілені моделі відрізняються за величинами просторового опису, а також процесами, що враховується у них.

Крім розподілу моделей відповідно до критеріїв, відзначених вище, їх можна класифікувати на статичні і динамічні в залежності від того, чи описують вони тимчасову динаміку процесів чи ні.

Важливу групу аналітичних моделей складають статистичні моделі, у яких залежність прогнозованих величин від внутрішніх та зовнішніх перемінних визначається за допомогою методів математичної статистики.

Поряд із класифікацією, основаної на загальних ознаках, моделі міграції радіонуклідів по специфіці охоплення розглянутих процесів представляється раціональним розділити на 6 груп:

– моделі міграції радіонуклідів у ґрунтах;

– моделі аерального забруднення посівів сільськогосподарських культур;

– моделі міграції радіонуклідів у системі "ґрунт – рослина";

– моделі перенесення радіонуклідів по харчових ланцюжках;

– моделі транспорту радіонукліда в агросфері;

– моделі транспорту радіонуклідів в організмі сільськогосподарських тварин.

Перші чотири групи містять у собі моделі міграції радіонуклідів в основних компонентах агроценозів (ґрунти, сільськогосподарські рослини), включаючи моделі метаболізму радіонуклідів в організмі тварин. Як правило, ці моделі відносяться до точкових, детермінованих, динамічних моделей. П'яту групу складають точкові статичні та динамічні моделі. У шосту групу входять моделі, у яких розглядається транспорт радіонуклідів у результаті великомасштабного забруднення сільськогосподарських угідь.

Доцільність подібного розподілу пояснюється тим, що моделі перших чотирьох груп звичайно використовують при розробці моделей міграції радіонуклідів по харчових ланцюжках і вони є основою для прогнозування транспорту радіонуклідів в агросфері. Такий розподіл моделей склався в радіоекологічній практиці історично і являється досить поширеним.

3.2.2 Моделювання вертикальної міграції радіонуклідів у профілі ґрунту

У моделях вертикальної міграції радіонуклідів звичайно враховується два механізми, що визначають швидкість протікання цього процесу - конвективний і квазідифузійний [26]. Ґрунт у цьому випадку розглядається як середовище, що складається з трьох фаз: твердої (ґрунтові частки), рідкої (ґрунтова волога) і газоподібної (ґрунтове повітря). Однак усе різноманіття процесів, від яких залежить переміщення радіонуклідів у профілі ґрунтів, зводиться до двох їх результуючих, які описуються узагальненими параметрами, що відносяться до усіх фаз одночасно. Особливе значення в моделюванні міграції радіонуклідів у профілі ґрунтів мають роботи радянських учених В.М. Прохорова, Л.В. Кириченко, В.Л. Анохіна, І.Є. Константинова, Ю.М. Свірежева, якими були узагальнені теоретичні й експериментальні дослідження в цій області. У припущенні про наявність стану динамічної рівноваги між радіонуклідами, що знаходяться у твердій і рідкій фазах ґрунту, в роботах цих авторів було запропоноване й обґрунтоване використання при описі міграції радіонуклідів рівняння конвективної дифузії:

$$dq(x, t)/dt = D(x, t)d^2 q(x, t)/dx^2 - \omega\, dq(x, t)/dx - \lambda q(x, t), \qquad (3.10)$$

де $q(x,t)$ - середня по усіх фазах концентрація радіонуклідів; $D(x, t)$ - ефективний коефіцієнт квазідифузії; ω - лінійна швидкість перенесення радіонуклідів під дією потоку вологи; λ - постійна радіоактивного розпаду.

Для того щоб застосувати рівняння (3.10) для вирішення практичних задач, його необхідно доповнити початковими і граничними умовами. У загальному вигляді це можна зробити в такий спосіб.

Початкові умови:

$$d(x, t) = \varphi(x) \quad \text{при} \quad x>0,\ t=0. \tag{3.11}$$

Граничні умови на нескінченності:

$$\left.\begin{aligned} q(x,t) &= 0 \\ dq(x,t)/dx &= 0 \end{aligned}\right\} \quad при \quad ч \to \infty,\ t > 0. \tag{3.12}$$

Умови на границі розподілу "атмосфера–ґрунт" допускають не єдине уявлення. Так, їх можна розглядати у вигляді заданого певним чином потоку радіонуклідів через поверхню розподілу середовищ:

$$dq(x, t)/dx - \omega_q(x, t) = f_1(t) \quad \text{при} \quad x = 0,\ t > 0, \tag{3.13}$$

або задавати залежність концентрації радіонуклідів на поверхні ґрунту від часу:

$$q(x, t) = f_2(t) \quad \text{при} \quad x = 0,\ t > 0. \tag{3.14}$$

Обидві форми уявлення граничних умов однаково правомірні, тому застосування якої-небудь з них залежить від особливостей моделюємої ситуації.

В основі аналітичних моделей вертикальної міграції лежить припущення про часову та просторову однорідність шару ґрунту, у якому розглядається процес міграції. Таке спрощення є достатнім для того, щоб отримати аналітичні рішення рівняння (3.10) для цілого ряду практично важливих випадків.

1. Однократне забруднення поверхні ґрунту. У цьому випадку умову на границі розподілу "атмосфера – ґрунт" необхідно розглядати в потоковій формі , у якій функцію $f_1(t)$ варто визначити як добуток двох співмножників :

$$f_1(t) = Q\delta(t),$$

де Q - поверхнева щільність випадінь; $\delta(t)$ - дельта-функція Дірака;

Рішення рівняння конвективної дифузії з граничними умовами,

$$\delta(t) = \begin{cases} \infty \ \ при \ \ t = 0 \\ 0 \ \ при \ \ t \neq 0. \end{cases}$$

описаними вище, та нульовими початковими умовами $\varphi(x)= 0$, можна одержати у вигляді:

$$q(x,t) = Q\exp(-\lambda t)\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi Dt}}\exp\left[-\frac{(x-\omega t)^2}{4Dt}\right] - \frac{\omega}{2D}\exp\left(-\frac{\omega x}{D}\right)erfc\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} + \frac{\omega}{t}\sqrt{\frac{1}{D}}\right)\right\} \quad (3.15)$$

де $erfc(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_x^{\infty}\exp(-t^2)dt$ – інтеграл ймовірності.

2. Аналогічно, у потоковій формі на границі розподілу середовищ, можна записати граничні умови й у випадку рівномірного випадання радіонуклідів протягом деякого проміжку часу:

$$f_1(t) = \begin{cases} q_0 \ \ при \ \ 0 < t < T \\ 0 \ \ при \ \ t > T \end{cases}.$$

Рішення рівняння (3.1) при такій граничній умові має досить складний вигляд. Однак для наближених розрахунків при виконанні умови

$$\frac{x}{2}\sqrt{Dt} + \omega\sqrt{\frac{t}{2D}} \geq 1{,}5$$

його можна використовувати й у більш простій формі:

$$q(x,t) = \frac{q_0}{\sqrt{D}}\exp\left(2\sqrt{\alpha\beta}\right)\begin{cases} \Phi(t) \quad при \ \ 0 < t < T \\ \Phi(t) - \Phi(t-T) \ \ при \ \ t > T \end{cases} \quad (3.16)$$

$$\Phi(t) = \left(\frac{1}{2\sqrt{c}} + \frac{\beta}{2\lambda\sqrt{c}} - \frac{\sqrt{\beta}}{2\lambda}\right)\exp\left(-2\sqrt{\lambda c}\right)erfc\left(\sqrt{\frac{\alpha}{t} - \sqrt{ct}}\right);$$

$$\beta = \frac{\omega^2}{2D}; \quad c = \beta + x; \quad \alpha = \frac{x^2}{4D}.$$

3. Часто зустрічається такий режим забруднення, коли радіоактивні випадання з перемінною інтенсивністю продовжуються протягом тривалого проміжку часу. У цьому випадку граничні умови на поверхні ґрунту задають у вигляді залежності поверхневої концентрації радіонуклідів від часу: $f_2(t) = q(0,t)$. Відповідне рішення рівняння має вид:

$$q = (x,t) = x\exp\left[\frac{\omega}{2D}x - \left(\frac{\omega^2}{4D} + \lambda\right)t\right]\int_0^t \frac{q(0,t)\exp\left(-\frac{x^2}{4D(t-\tau)}\right)}{(t-\tau)^{3/2}}d\tau \quad (3.17)$$

4. Практичний інтерес представляють умови забруднення, при яких вміст радіонуклідів у початковий момент часу в шарі ґрунту товщиною l постійний і дорівнює q_0. Такі умови відповідають ситуації, коли після випадання радіонуклідів забруднена ділянка переорюється і залишається згодом без обробки. У цьому випадку рішення рівняння квазідифузії з початковими і граничними умовами , де

$$\varphi(x)=\begin{cases} q_0 & при \quad 0<x<1 \\ 0 & при \quad x>1 \end{cases} \quad ; \quad t=1; f_2(t)=0 \quad \text{при} \quad x = 0,\ t>0,$$

за допомогою нескладних перетворень можна представити в наступній формі:

$$q(x,t)=\frac{q_0}{2}\exp\left[\frac{\omega}{2D}x-\left(\frac{\omega^2}{4D}+\lambda\right)t\right]\left\{erf\left(\frac{1-x}{2\sqrt{Dt}}\right)+erf\left(\frac{1+x}{2\sqrt{Dt}}\right)\right\}; \quad (3.18)$$

$$erf(x)=2/\sqrt{\pi}\int_0^x \exp(-t^2)dt.$$

Крайові задачі, що описують вертикальну міграцію радіонуклідів, можуть бути реалізовані не тільки у вигляді аналітичних виразів (моделей), але й у вигляді програм для ПЕОМ (імітаційних моделей). При цьому слід зазначити, що машинна реалізація моделей міграції має ряд важливих переваг, оскільки дозволяє відмовитися від обмежень, необхідних при використанні аналітичних моделей. Внаслідок цього застосування імітаційних моделей дозволяє прогнозувати перенесення радіонуклідів у ґрунтах, що не відрізняються однорідною структурою, враховувати сезонні коливання погодних умов, що впливають на процес вертикальної міграції.

Крім безпосереднього рішення крайових задач чисельними методами, при створенні імітаційних моделей вертикальної міграції радіонуклідів у ґрунті використовується й інший підхід - компартментний . У його рамках ґрунт розглядається як середовище, що складається з визначеної кількості шарів (компартментів), між якими описується переміщення радіонуклідів. У межах кожного шару ґрунту, на як поділений профіль, його властивості, а отже, і параметри переносу радіонуклідів приймаються постійними для кожної пори року. Процес переміщення розглядається як дискретний у часі та по координаті. При цьому передбачається, що кількість радіонуклідів, що виходить з якого-небудь шару ґрунту, дорівнює тій кількості, що надходить у наступний шар грунту.

При такій постановці задачі баланс радіонуклідів у *i*-ому шарі ґрунту можна представити у вигляді:

$$Q_{j+1,\,i} = Q_{j,i} + I_{вх} - I_{вих}\,, \qquad (3.19)$$

де $Q_{j,i}$ - вміст радіонуклідів у *i*-му шарі в *j*-й момент часу; $I_{вх}$ і $I_{вих}$ - сумарні потоки радіонуклідів, що надходять у *i*-й шар і виходять з нього.

Найбільше поширення цей підхід одержав при розробці компартментних моделей міграції радіонуклідів у системі "ґрунт - рослина", у яких потоки радіонуклідів між шарами розглядаються прямо пропорційно вмісту радіонуклідів в окремих шарах ґрунту:

$$I_{вх} = (\lambda_{j,\,i+1}\, Q_{j+1} + \lambda_{j,\,i}\, Q_{j,\,i-1})\Delta t\,,$$
$$I_{вих} = (\lambda_{j+1,\,i}\, Q_{j,\,i} + \lambda_{j-1,\,i}\, Q_{j,\,i-1})\Delta t, \qquad (3.20)$$

де $\lambda_{k,n}$ - коефіцієнт переходу радіонуклідів з *n*-го в *k*-й шар ґрунту.

Перевага такого переходу полягає в його простоті й можливості, у випадку заміни різницевих аналогів на диференціали, використання апарата звичайних диференціальних рівнянь.

При описі потоку радіонуклідів між шарами ґрунту використовуються і квазідифузійні уявлення. У цьому випадку для кожного шару ґрунту суму між вхідними і вихідними потоками можна представити як:

$$I_{вх} - I_{вих} = (-D \cdot dQ/dx + \omega Q)\Delta t. \qquad (3.21)$$

Для ілюстрації застосування імітаційних моделей можна використовувати результати розрахунків, де застосовувалася компартментна модель, у якій опис переносу ^{90}Sr між компартментами відповідало виразу (3.12). Розрахунок зроблено для двох випадків.

У першому випадку імітували міграцію радіонуклідів в умовах, близьких до природних. При цьому профіль ділили на 4 шари і для кожного задавали різні значення *D* і ω (табл. 3.1).

Для періодів з позитивними і негативними температурами ґрунту (перша і друга половини року) узяті різні чисельні значення. Чисельні значення *D* і ω відповідають ґрунтам із промивним режимом і близькі до значень в реальних умовах. Радіоактивний розпад при цьому не враховував

У другому випадку приймалось, що профіль можна охарактеризувати постійними параметрами *D* і ω, для яких використовувалися середньочасові величини із значень, прийнятих у першому випадку. Через 15 років після надходження ^{90}Sr на поверхню ґрунту розрахункові профілі його розподілу в першому і в другому випадках істотно розрізняються . Це дозволяє зробити висновок, що

розгляд неоднорідного в дійсності середовища як однорідного, як це часто робиться при застосуванні аналітичних моделей, може призвести до істотних похибок. Внаслідок цього у випадках, коли розподіл радіонуклідів у шарі ґрунтів необхідно визначити з достатньою точністю, доцільно використовувати імітаційні моделі.

Таблиця 3.1 - Значення параметрів міграції в шарах ґрунтового профілю

Шар грунту,см	D, см^2/рік	D, см^2/рік	ω, см/рік	ω, см/рік
	для першої половини року	для другої половини року	для першої половини року	Для другої половини року
0–3	1,3	1,3	1,3	0
3–6	7,5	7,5	3,8	0
6–9	1,8	1,8	1,8	0
9–30	7,5	7,5	3,8	0
0–30	6,3	6,3	3,2	0

Аналізуючи труднощі в застосуванні моделей вертикальної міграції, слід зазначити, що в даний час їх широке використання стримується не відсутністю теоретичних підходів і конкретних моделей, а скоріше відсутністю необхідної інформації про параметри міграції для широкого спектра радіонуклідів. При цьому слід зазначити, що більша частина такого роду досліджень відноситься до вивчення впливу характеристик ґрунтів на параметри міграції ^{90}Sr і проведена групою вчених під керівництвом В.М. Прохорова.

Підсумком цього циклу робіт було отримане В.М. Прохоровим рівняння множинної регресії, що зв'язує коефіцієнт квазідифузії ^{90}Sr з властивостями ґрунтів [28]:

$$D = \alpha \Pi_{Ai}^{\alpha i} = \exp(-E/RT), \qquad (3.22)$$

де A_I - властивості ґрунту; αt - чисельні коефіцієнти, E - енергія активації; R - газова постійна; T - абсолютна температура.

Для вимірювання коефіцієнтів дифузії радіонуклідів у ґрунтах застосовується досить великий набір методів. В основі більшості з них лежить зіставлення емпіричного розподілу радіонуклідів у ґрунтовому шарі з теоретичним, отриманим на підставі математичної моделі, що описує цей процес. Параметри міграції знаходять шляхом рішення зворотної задачі або підбором таких значень параметрів, при яких теоретичний розподіл відповідає емпіричному.

Аналогічна ідея лежить в основі наближених методів прогнозу міграції радіонуклідів у неоднорідному шарі ґрунту, розроблених на основі використання аналітичних моделей. Відповідно до цього підходу за експериментальними даними, вираженими у вигляді відносного вмісту радіонуклідів у шарі ґрунту визначеної товщини χ, знаходять уявний коефіцієнт дифузії. Він дорівнює такому значенню цього параметра, при

якому розрахунковий вміст радіонуклідів у цьому шарі, отриманий на основі дифузійного рівняння, відповідає емпіричному.

Для оцінки розрахункового відносного вмісту радіонуклідів у шарі ґрунту використовується вираз

$$\chi = \int_0^l q(x,t)dx / \int_0^\infty q(x,t)dx. \qquad (3.23)$$

Математичні моделі міграції радіонуклідів у профілі ґрунтів знайшли широке застосування в радіоекологічній практиці. Їхнє значення визначається не тільки тим, що вони дозволяють прогнозувати вміст радіонуклідів у шарі ґрунту, де мешкає коренева система, та забруднення сільськогосподарської продукції. Вони використовуються і при розрахунках дозових навантажень зовнішнього опромінення населення, при дослідженні переходу радіонуклідів у ґрунтові води, а також при оцінці вимивання радіонуклідів з верхнього шару ґрунтів і забруднення поверхневих вод.

3.2.3 Моделі міграції радіонуклідів у системі "ґрунт – рослина"

Для моделювання міграції в системі "ґрунт - рослина" характерним є використання методів технічної кібернетики, що лежать в основі побудови й аналізу компартментних (камерних) моделей [21]. З точки зору опису міграції компартментом можна вважати будь-який елемент агроценозу чи його частину, у якому відбувається накопичення радіонуклідів.

У рамках такого підходу агроценоз розглядається у вигляді сукупності однорідних компартментів, між якими відбувається перенесення радіонуклідів, що характеризується деякими функціями $a_{i,j}$. Ці функції мають сенс інтенсивних потоків радіоактивних речовин між компартментами і у загальному вигляді залежать від ряду ендогенних і екзогенних факторів.

При математичному описі перенесення речовин у компартментних моделях використовують апарат звичайних диференціальних рівнянь:

$$\frac{dq_i(t)}{dt} = \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq 1}}^{n} a_{ji} - \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq 1}}^{n} a_{ik} + a_{0i} - a_{i0}, \qquad (3.24)$$

де $q_i(t)$ - вміст речовини в i-му компартменті; a_{ji} - кількість речовини, що надходить за одиницю часу в i-й компартмент із j-го; a_{0i} і a_{i0} – швидкості надходження і виведення речовини в системі.

У випадках, коли компартментний підхід застосовується для моделювання міграції радіонуклідів, часто передбачається, що

інтенсивність переходу радіонуклідів з *i*-го компартмента в *j*-й пропорційна вмісту радіонуклідів у *i*-му компартменті:

$$a_{ij} = \omega_{ij} q_i, \qquad (3.25)$$

де функція ω_{ij} відповідає швидкості перенесення радіонуклідів при одиничному їхньому вмісті в *i*-му компартменті.

Існує кілька підходів для визначення функцій перенесення. Найбільш простим, який часто використовується, являється заміна функцій ω_{ij} деякими константами, що відповідають середнім значенням цих функцій на визначеному відрізку часу:

$$k_{ij} = \int_0^T \omega_{ij}(\tau) d\tau / T . \qquad (3.26)$$

Отримані в такий спосіб константи залежать від періоду осереднення, оптимальний вибір якого часто представляє значні труднощі. На практиці період осереднення варто вибирати таким чином, щоб дотримувалася приблизна постійність осереднених параметрів. Зокрема, при моделюванні міграції довгоживучих радіонуклідів використовується період осереднення за один рік.

Як приклад, що ілюструє застосування компартментних моделей міграції радіонуклідів у системі "ґрунт - рослина", нижче розглянемо модель, яка призначена для прогнозування забруднення корене- і бульбоплодів.

На схемі міграції, що приведена на рис. 3.3, компартмент *1* представляє орний шар ґрунту з рівномірно розподіленою концентрацією радіонуклідів, компартмент *2* - підкореневу зону ґрунту, компартмент *3* - вегетативні надземні частини рослин, компартмент *4* - господарсько цінні частини рослин. Константи k_{ij} , описують наступні процеси: $k_{1,3}$ - повторне запилення, $k_{3,1}$ - здування вітром і змивання дощем, $k_{1,4}$ - надходження за рахунок кореневого засвоєння, $k_{3,4}$ - перенесення з коріння у надземну частину рослин, $k_{1,2}$ - винесення радіонуклідів за межі шару грунту, де мешкає коріння, в результаті вертикальної міграції, $k_{3,3}$ і $k_{4,4}$ - винесення радіонуклідів при збиранні врожаю. Коефіцієнт $k_{4,1}$ - формальна константа, що забезпечує пропорційність вмісту нуклідів у компартментах *4* і *1*.

Система диференціальних рівнянь, що відповідає схемі міграції радіонуклідів, приведена на рис. 3.3, має вигляд:

$$dq_1/dt = k_{3,1}q_3 + k_{4,1}q_4 - (k_{1,3} + k_{1,4} + k_{1,2} + \lambda)q_1; \qquad (3.27)$$

$$dq_2/dt = k_{1,2}q_1 - \lambda q_2; \qquad (3.28)$$

$$dq_3/dt = k_{1,3}q_1 - (k_{3,1} + k_{3,4} + k_{3,3} + \lambda)q_3; \qquad (3.29)$$

$$dq_4/dt = k_{1,4}q_1 + k_{3,4}q_3 - (k_{4,1} + k_{4,4} + \lambda)q_4. \quad (3.30)$$

Рішення цих рівнянь дозволяють прогнозувати вміст радіонуклідів у виділених у моделі компартментах системи "ґрунт - рослина". Результати такого розрахунку, виконаного з використанням констант перенесення, приведених у табл. 3.2.

Таблиця 3.2 - Константи перенесення радіонуклідів в системі "ґрунт - корне- і бульбоплід"

Радіо-нуклід	$k_{1,2}$	$k_{1,3}$	$k_{1,4}$	$k_{3,1}$	$k_{3,4}$	$k_{3,3}$; $k_{4,4}$	$k_{4,1}$	λc^{-1}
^{106}Ru	2,2-10	7,0-9	5,6-5	2,7-7	1,4-8	3,2-8	1,0	2,2-8
^{131}I	2,2-10	7,0-9	1,1-4	2,7-7	3,0-8	3,2-8	1,0	1,0-6
^{137}Cs	2,2-10	7,0-9	2,8-5	2,7-7	3,0-8	3,2-8	1,0	7,3-10
^{90}Sr	2,2-10	7,0-9	1,7-5	2,7-7	5,5-9	3,2-8	1,0	2,9-8

Більш складними вважаються компартментні моделі, у яких приймається до уваги взаємозв'язок стану компартментів зі швидкістю переносу радіонуклідів між ними. У таких моделях поряд з міграційною задачею розглядається система, що імітує властивості компартментів, які впливають на процес міграції в системі "ґрунт - рослина". Прикладом такого підходу може служити модель, що описує накопичення *Pu* в органах бобових рослин.

Модель складається з двох підмоделей "Біомаса" і "Накопичення". У першій з них за допомогою логістичної моделі розглядається зміна біомаси окремих органів:

$$W_{t,i} = \frac{W_{0,i}(1+b_i)}{1+b_i^{-k_i(t-t_{0,i})}} - W_{0,i} \quad (3.31)$$

де $W_{t,i}$ - маса i-го органа рослини в момент часу t, комбінація індексів 0, i відповідає моменту часу, коли починається розвиток i-го органа; b_i і k_i, - позитивні константи, що характеризують розвиток органів рослин.

Підмодель "Накопичення" містить у собі систему рівнянь, у яку входять: по перше, рівняння, що імітують вміст радіонуклідів у кожнім компартменті (органі рослин), по друге, вирази, у яких розраховується інтенсивність потоків радіоактивних речовин між цими компартментами:

$$dq_R/dt = a_{0,R} - a_{R,B}\ ; \quad (3.32)$$

$$dq_B/dt = a_{R,B} - a_{B,P} - a_{B,L}\ ; \tag{3.33}$$

$$\frac{dq_L}{dt} = (q_B + a_{R,B})(b_{1,L}W_{t,L} + b_{2,L}\frac{dW_{t,L}}{dt})\ ; \tag{3.34}$$

$$\frac{dq_P}{dt} = a_{BP} - \frac{dq_S}{dt}\ ; \tag{3.35}$$

$$\frac{dq_S}{dt} = \chi\frac{dq_P}{dt}\ ; \tag{3.36}$$

$$a_{0,R} = q_0(b_{1,R}W_{t,R} + b_{2,R}\frac{dW_{t,R}}{dt})\ ; \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned} a_{R,B} &= (q_R + a_{0,R})(b_{1,B}W_{t,B} + b_{2,B}\tfrac{dW_{t,B}}{dt} + b_{1,L}W_{t,L} + \\ &+ b_{2,L}\tfrac{dW_{t,L}}{dt} + b_{1,P}W_{t,P} + b_{2,P}\tfrac{dW_{t,P}}{dt}); \end{aligned} \tag{3.38}$$

$$a_{B,P} = (q_B + a_{R,B})(b_{1,L}W_{t,L} + b_{2,L}\frac{dW_{t,L}}{dt})\ ; \tag{3.90}$$

$$a_{B,P} = (q_B + a_{R,B})(b_{1,P}W_{t,P} + b_{2,P}\frac{dW_{t,P}}{dt}). \tag{3.40}$$

У системі цих рівнянь перемінні q_R, q_B, q_L, q_P і q_S мають сенс вмісту радіонуклідів в органах рослин ; $a_{0,R}$, $a_{R,B}$, $a_{B,P}$ і $a_{B,L}$ - швидкість переносу радіонуклідів між ними.

Параметри підмоделі "Накопичення" можна умовно розділити на дві частини, першу з якої складають величини, що відносяться до маси органів, а другу – величини, які характеризуються приростом маси. Сукупність цих параметрів відображає специфічне перенесення поживних речовин і радіонуклідів в окремі органи рослини. Перехід радіонуклідів із стручків у насіння розраховувався за допомогою простої пропорції. Значення коефіцієнта пропорційності χ було прийнято рівним 1,1.

Таблиця 3.3 - Параметри, використані при моделюванні міграції радіонуклідів в системі "гідропонний розчин - рослина"

Орган Рослини	Параметри			
	W_0, г	b	K	t_0, доба
Корінь	$5\cdot10^{-3}$	3600	0,137	0
Стебло	$5\cdot10^{-4}$	800	0,184	12
Листя	$5\cdot10^{-3}$	919	0,142	12
Стручок	$5\cdot10^{-3}$	1200	0,417	59
Насіння	$5\cdot10^{-4}$	2000	0,354	59

Розглянута модель використовувалася для вивчення динаміки накопичення радіонуклідів органами рослин при забрудненні ґрунту в різні періоди вегетації. Розрахунки показали, що найбільша чутливість до періоду забруднення характерна для вмісту радіонуклідів у листях. Істотно меншою чутливістю до цього показника характеризується вміст радіонуклідів в насіннях.

Таблиця 3.3а - Параметри, використані при моделюванні міграції радіонуклідів в системі "гідропонний розчин - рослина"

Орган рослини	Параметри, які органа, г	З'вязані з масою	Параметри, які зміною маси	З'вязані із органами, г/доба
	Позначення	величина	Позначення	Величина
Корінь	$b_{1,R}$	100	$b_{2,R}$	28,6
Стебло	$b_{1,S}$	$3{,}9\cdot10^{-6}$	$b_{2,S}$	$1{,}6\cdot10^{-2}$
Листя	$b_{1,L1}$	$3{,}5\cdot10^{-4}$	$b_{2,L1}$	$2{,}2\cdot10^{-1}$
	$b_{1,L2}$	$7{,}0\cdot10^{-3}$	$b_{2,L2}$	4,0
Стручок	$b_{1,P1}$	$3{,}6\cdot10^{-5}$	$b_{2,P1}$	$2{,}3\cdot10^{-2}$
	$b_{1,P2}$	$2{,}4\cdot10^{-4}$	$b_{2,P2}$	$7{,}7\cdot10^{-2}$

В даний час такі моделі відносяться до дослідницьких, оскільки основна мета їх створення – перевірка і поглиблення теоретичних представлень про міграцію радіонуклідів. Однак можливості, що вони надають, дозволяють очікувати їх практичного використання.

Поряд з методами технічної кібернетики при моделюванні міграції радіонуклідів у системі "ґрунт – рослина" широко використовуються і статистичні моделі. Для їхньої побудови в більшості випадків застосовується апарат класичного регресійного аналізу. При цьому передбачуваною величиною (предиктантом) звичайно служить коефіцієнт накопичення радіонуклідів (КН) у господарчо цінних частинах врожаю сільськогосподарських культур. Вектор величин, за допомогою яких здійснюється прогноз (предикторів), складають різні характеристики ґрунтів. Часто використовують наступні параметри: вміст неізотопних носіїв, суму обмінних основ і кислотність ґрунтового розчину, механічний склад ґрунтів і вміст гумусу в них.

У загальному вигляді статистичні моделі можна представити в наступній формі:

$$KH = L^T X = Q^T C^{-1} X \,, \qquad (3.41)$$

де L - вектор коефіцієнтів регресії; X - вектор незалежних величин (предикторів); Q - вектор, складений з коефіцієнтів коваріації між

передбачуваним *КН* і складовими вектора *X*; C^1 - матриця, зворотна коваріаціонній матриці предикторів; *T* - знак транспонування.

Важливою обставиною, що утруднює застосування статистичних моделей, є тісна кореляція між параметрами, що характеризують властивості ґрунту. При цьому чим більше перемінних закладається в статистичні моделі і чим вище ступінь кореляції між ними, тим гірше обумовленою є система лінійних рівнянь.

Рішення систем такого роду відрізняється великою чутливістю до малих змін вхідних даних, потребує отримання експериментальних даних з високим ступенем точності, який не завжди може бути досягнутий.

Незважаючи на відзначені труднощі у їхньому використанні, статистичні моделі не тільки знаходять застосування в радіоекологічній практиці, але і завдяки своїй наочності й простоті можуть бути в деяких випадках і оптимальним засобом одержання прогностичних залежностей.

3.2.4. Моделювання міграції радіонуклідів у посадках верби корзинової (*Salix viminalis L.*) при фіторeабілітації забруднених земель зони ЧАЕС

Побудова такої моделі, достатньо добре обгрунтованої теоретично і біологічно, пов'язана з розглядом, з одного боку, єдиної суцільної біогеоценотичної системи "грунт - рослина - атмосфера", яка функціонує в умовах радіоактивного забруднення, а з другого боку, описом складних і різноманітних процесів гідрометеорологічного режиму, що формується в цій системі, впливу цього режиму на найважливіші процеси життєдіяльності рослин і їх взаємозв'язок (фотосинтез, дихання, поглинання елементів мінерального живлення, ріст і розвиток рослин), та поглнння і накопичення рослиною радіонуклідів [27]. Основним призначенням моделі є багатоцільова оцінка та прогноз наслідків фіторeабілітації забруднених земель зони ЧАЕС. Прикладний характер моделі визначає і вимоги до вхідної інформації, модель реалізується на основі реально існуючої стандартної гідрометеорологічної інформації.

Концепція моделювання

Структура моделі визначається виходячи з закономірностей формування гідрометеорологічного режиму в системі "грунт - рослина - атмосфера" і біологічних уявлень про ріст і розвиток природної чагарникової рослинності під впливом чинників зовнішнього середовища. У основі моделі лежить система рівнянь радіаційного, теплового і водного балансів, балансу біомаси і радіонуклідів у рослинному покриві.

Основні концептуальні положення такі:

- ріст і розвиток рослин визначається генотипом і чинниками зовнішнього середовища;
- моделюється ріст рослин (накопичення сухої біомаси) шляхом розподілу продуктів фотосинтезу і поглинених елементів мінерального

живлення з урахуванням потреб для росту в асимілятах надземної і підземної частин рослин;

- моделюються радіаційний, тепловий і водний режими системи "грунт - рослина - атмосфера";

- моделюється азотне живлення рослин;

- моделюється кореневе засвоєння радіонуклідів рослинами і їхній розподіл між окремими органами рослин та їх складовими частинами;

- моделюється гідроліз рослинної тканини при старінні рослин і в стресових умовах, а також перетік продуктів гідролізу з листя у пагони;

- моделюється перетік частини радіонуклідів у пагони при старінні і відмиранні листя.

Модель складається з 9 блоків:

1. Блок вхідної інформації.
2. Блок радіаційно-теплового режиму рослинного покриву.
3. Блок водного режиму рослинного покриву.
4. Блок фотосинтезу.
5. Блок дихання і старіння рослин.
6. Блок мінерального живлення.
7. Блок росту (розподіл приросту біомаси і радіонуклідів).
8. Блок формування площі листя.
9. Блок накопичення радіонуклідів.

Розглядається, що рослина складається з двох функціонально пов'язаних частин: надземної (shoot) і підземної (root), які у свою чергу розділяються на окремі органи або їх складові частини. Виділяються: функціонуючі листки (lfunc), пожовклі листки (lyel), відмерлі листки (lmor), зелені пагони (sgr), здеревілі пагони (swood), функціонуючі корені (rfunc), здеревіли корені (rwood), корені, що відмирають (rdec), відмерлі корені (rmor). Маса (m) окремих i-их органів і їхніх частин складається з двох компонентів - маси вуглеводів (C) і маси азоту (N). У цій масі рослиною накопичується кожний з розглядуваних нами f-видів радіонуклідів - Af. Моделюється, що під впливом екзогенних і ендогенних чинників у рослині відбувається формування єдиного фонду вільних вуглеводів C_{lab}, єдиного фонду вільного азоту N_{lab} і єдиного фонду радіонуклідів A^f_{lab}. Часовий крок моделі - доба.

Опис структури моделі міграції радіонуклідів у посадках верби корзинової (Salix viminalis L.)

Блок вхідної інформації

Передбачається використання стандартної добової метеорологічної інформації (кількість годин сонячного сяйва; середня, максимальна і мінімальна температура повітря; температура поверхні грунту і на глибинах; абсолютна і відносна вологість повітря; дефіцит насичення повітря; сума опадів; швидкість вітру), характеристик агрофізичного й агрохімічного стану грунтів, водного режиму грунтів, забруднення грунтів

радіонуклідами; задаються початкові характеристики рослинного покриву, початкові та граничні умови для рішення системи рівнянь. Задається динаміка концентрації доступних форм радіонуклідів у грунті протягом періоду вегетації верби корзинової.

Блок радіаційного і теплового режиму рослинного покриву

Радіаційний баланс рослинного покриву можна уявити у вигляді суми довгохвильової і короткохвильової радіації:

$$R_L = Q_L + F_L \; ; \tag{3.42}$$

$$R_S = Q_S + F_S \; , \tag{3.43}$$

де R_L і R_S - радіаційний баланс рослинного покриву (РП) і поверхні грунту (ПГ); Q_L, Q_S - кількість поглиненої короткохвильової радіації РП і ПГ; F_L, F_S - величини балансу довгохвильової радіації РП і ПГ.

Кількість *поглиненої короткохвильової радіації* РП і ПГ визначається за допомогою співвідношень:

$$Q_L = Q_o \; (1-\alpha_{LS}), \tag{3.44}$$

$$Q_S = Q_o a_Q \; (1-\alpha_S), \tag{3.45}$$

де Q_o - сумарна короткохвильова радіація над верхньою межею РП; α_{LS} і α_S - альбедо РП і ПГ; a_Q - функція пропускання сумарної радіації РП.

Альбедо РП розраховується за допомогою формули:

$$\alpha_{LS} = \alpha_{Lh_o} + (\alpha_S - \alpha_{Lh_o}) \exp[-L(1 + \mathrm{ctgh}_o / \pi)], \tag{3.46}$$

де

$$\alpha_{Lh_o} = \frac{0{,}4084}{1 + 1{,}1832 \sinh_o}.$$

Альбедо ПГ визначається в залежності від зволоження грунту за виразом:

$$\alpha_S = \begin{cases} \alpha_S^{\max} & при \quad W_{SS} < W_{WP} \\ \alpha_S^{\max} - (\alpha_S^{\max} - \alpha_S^{\min}) \dfrac{W_{SS} - W_{WP}}{W_{FC} - W_{WP}} & при \quad W_{WP} \le W_{SS} \le W_{FC} \\ \alpha_S^{\min} & при \quad W_{SS} > W_{FC} \end{cases} \tag{3.47}$$

де α_S - альбедо ПГ; $\alpha_S^{max}, \alpha_S^{min}$ - альбедо сухого і достатньо зволоженого грунту; W_{SS} - вологість поверхневого шару грунту; W_{WP} - вологість стійкого в'янення; W_{FC} - найменша вологоємність грунту.

Функція пропускання сумарної радіації визначається за формулою Тооминга-Росса:

$$a_Q = (1 - c_2)\exp\left(-\frac{k_s^L L}{\sinh_o}\right) + c_2 \exp\left(-c_3 \frac{k_s^L L}{\sinh_o}\right), \qquad (3.48)$$

де c_2 і c_3 - емпіричні постійні; k_S^L - емпірична постійна, що характеризує вплив геометричної структури РП на пропускання сонячної радіації.

Величина *балансу довгохвильової радіації* визначається за допомогою слідуючих формул:

$$F_L = (F_A + \varepsilon_S \sigma T_S^4 - 2\varepsilon_L \sigma T_L^4)(1 - e^{-kL}), \qquad (3.40)$$

$$F_S = F_A e^{-kL} - \varepsilon_S \sigma T_S^4 + \varepsilon_L \sigma T_L^4 (1 - e^{-kL}), \qquad (3.49)$$

де F_A - противипромінювання атмосфери; ε_L і ε_S - коефіцієнти сірості листя; σ - постійна Стефана-Больцмана; T_L і T_S - температура листя і грунту; k - емпіричний параметр орієнтації листя.

Противипромінювання атмосфери визначається за виразом:

$$F_A = \varepsilon_a \sigma T_a^4, \qquad (3.50)$$

T_a - температура повітря; ε_a - коефіцієнт довгохвильового випромінювання, який визначається з емпіричної формули:

$$\varepsilon_a = 0{,}398 \cdot 10^{-5} \cdot T_a^{2,148}. \qquad (3.51)$$

Температура листя визначається як

$$T_L = T_a. \qquad (3.52)$$

Потік тепла в грунт береться пропорційним радіаційному балансу ПГ:

$$B_S = c_{BS} R_S, \qquad (3.53)$$

де c_{BS} - емпірична постійна.

Блок водного режиму рослинного покриву

Вологоперенесення у грунті. Рівняння потоку води в системі "грунт - корінь" розглядається аналогічно одночасно як насичене і ненасичене середовище:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{C(\psi)}\frac{\partial}{\partial z}\left[K(\Theta)\left(\frac{\partial\psi}{\partial z}+1\right)\right] - \frac{S(\psi)}{C(\psi)}, \qquad (3.54)$$

де ψ - потенціал тиску грунтової вологи; $C(\psi) = \frac{d\Theta}{d\psi}$ - диференціальна вологоємність; $K(\Theta)$ - гідравлічна провідність; Θ - об'ємна вологість; $S(\psi)$ - поглинання вологи коренями; t - час; z - вертикальна координата.

Як початка умова (t = 0) задається

$$\psi(z, t=0) = \psi_o(z) \qquad (3.55)$$

За граничні умови приймається:

- на нижній межі (z_{so}) потенціал тиску задається як

$$\psi(z = z_{so}, t) = \psi_{so}(t), \qquad (3.56)$$

на рівні грунтових вод величини $C(\psi) = 0$ і $\psi(z_{so}, t) = 0$;

- на поверхні грунту z_o (верхня межа):

$$P_s - E = -K(\Theta)\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}+1\right) \quad \text{при } P_s - E < J_{max}; \qquad (3.57)$$

$$\Theta = \Theta_{max} \quad \text{при} \quad P_s - E \geq J_m$$

де P_s - сума опадів, що досягли поверхні грунту; E - випаровування із поверхні грунту; J_{max} - максимально можлива інтенсивність інфільтрації при вологості грунту на його поверхні, рівняється Θ_{max} .

Сума опадів, що досягли поверхні грунту, знаходиться як:

$$P_s = P_o - P_L, \qquad (3.58)$$

де P_o - сума опадів, що випали; P_L - сума опадів, перехоплених рослинним покривом, яка залежить від величини листкового апарата:

$$P_L = 0{,}2\, L, \qquad (3.59)$$

L - відносна площа листкової поверхні (листковий індекс).

Величина джерельно-стокового члена S(ψ) визначається в залежності від потенціалу тиску і максимальної швидкості поглинання вологи S_{max} :

$$S(\psi) = \alpha_s(\psi)\, S_{max} / f_{depth}^{root} \qquad (3.60)$$

вважаємо, що

$$S_{max} = T_r\,, \qquad (3.61)$$

де T_r - транспірація; f_{depth}^{root} - функція розподілу коренів по глибині; α_s (ψ) - функція впливу водного потенціалу грунту на поглинання вологи кореневою системою.

Транспірація рослинного покриву визначається за допомогою формули Пенмана:

$$T_r = \frac{\Delta\left(\frac{R_L}{\lambda}\right)}{\Delta+\gamma_{ef}} + \frac{ET_{pot}}{\Delta+\gamma_{ef}}\,, \qquad (3.62)$$

де Δ - нахил кривої залежності тиску насиченої водяної пари від температури повітря; γ_{ef} - ефективна психрометрична постійна; R_L - радіаційний баланс РП; ET_{pot} - випаровуваність; λ - прихована теплота пароутворення.

Випаровуваність визначається за допомогою рівняння:

$$ET_{pot} = \frac{(e_s - e_a)\rho c_p}{r_a}\,, \qquad (3.63)$$

де e_s - тиск насиченої пари при даній температурі повітря; e_a- фактичний тиск водяної пари; ρ- щільність повітря; c_p- теплоємність повітря; r_a- опір примежового шару.

Ефективна психрометрична постійна знаходиться як:

$$\nu_{ef} = \nu \frac{r_a + r_{st}}{r_a}\,, \qquad (3.64)$$

где ν - психрометрична постійна; r_{st} - продиховий опір дифузії водяної пари для листя.

Опір примежового шару визначається за виразом:

$$r_a = \frac{\ln\left[(z - d_o)/z_o\right]^2}{\chi^2 u}, \qquad (3.65)$$

где d_o - висота шару витіснення; z_o - висота шару шорсткості; χ - постійна Кармана; u - швидкість вітру на висоті z.

Продиховий опір визначається по формулі:

$$r_{st} = \frac{1}{g_n + \frac{g_x Q_o}{Q_o + p_r}} \qquad (3.66)$$

де g_n, g_x, p_r - емпіричні параметри.

Випаровування із поверхні грунту E_S визначається як:

$$E_S = \frac{(\Delta R_S)1{,}26}{\Delta + \gamma}, \qquad (3.67)$$

Рівень грунтових вод в період після припинення затоплення визначається за методом Шебеко:

$$H^{j+1}_{gr.w.} = H^{j}_{gr.w.} + \Delta H^{j}_{gr.w.} \qquad (3.68)$$

$$\Delta H_{gr.w.} = I_w / k_w\, 10 \qquad (3.69)$$

або

$$\Delta H_{gr.w.} = -V_p / k_w\, 10, \qquad (3.70)$$

де

$$I_w = W_n + P_o - Et_{opt} - W_{FC} \qquad (3.71)$$

і величина V_p знаходиться як

$$0 \le W_{PC} - (W_n + P_o - ET_{act}) \ge V_p \le V_{max.},$$

де $H_{gr.w.}$ - рівень грунтових вод; I_w - інфільтрація; V_p - розрахункове підживлення в зону аерації з грунтових вод; W_n - початковий вміст вологи в грунті; ET_{act} - сумарне випаровування; V_{max} - максимально можливе підживлення в зону аерації з грунтових вод; k_w - коефіцієнт водовіддачі.

Блок фотосинтезу

Фонд вільних вуглеводів рослин на кожному часовому кроці являє собою баланс продуктів фотосинтезу і продуктів розпаду тканин, які старіють, а також витрат на дихання:

$$\frac{dC_{lab}}{dt} = \Phi + C_{hydr} - R, \qquad (3.72)$$

де C_{lab} - фонд вільних вуглеводів; Φ - маса продуктів фотосинтезу посіву; C_{hydr} - маса вуглеводів, що утворюються при розпаді тканин, які старіють; R - витрати вуглеводів на дихання посіву.

Процес фотосинтезу листя описується з враховуванням впливу на фотосинтез рівня мінерального живлення, фази розвитку рослин, температурного режиму і вологозабезпеченості посівів:

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{1}{1/\Phi_{pot} K_{\Phi}(N_{str}^{L}) + 1/a_C C_0 + 1/a_{\Phi}\Pi} \min\left\{\alpha_{\Phi}, \Psi_{\Phi}, \frac{ET}{ET_{pot}}\right\}, \quad (3.73)$$

де Φ_{pot} - інтенсивність потенційного фотосинтезу; a - нахил вуглекислотної кривої фотосинтезу; C_0 - концентрація CO_2 у повітрі; a - нахил світлової кривої фотосинтезу; Π - поглинена рослинним покривом фотосинтетично активна радіація; α_{Φ} - онтогенетична крива фотосинтезу; Ψ_{Φ} - температурна крива фотосинтезу; $K_{\Phi}(N^{L}_{str})$ - коефіцієнт забезпеченості рослин елементами мінерального живлення

Блок дихання і старіння рослин

При стресових умовах і *старінні рослин* відбуваються процеси розпаду тканин. Ці процеси описуються рівняннями кінетики ферментативного каталізу. При достатньо високій концентрації гідролізуємого субстрату, швидкість розпаду може бути описана рівнянням реакції нульового порядку, а при достатньо низькому – рівнянням реакції першого порядку:

$$\frac{dC_{ihydr}}{dt} = K_{hydr}^{0} K_{hydr}(T_a) K_{hydr}(W), \quad \text{при} \quad C_i \geq C_{icrit}, \quad \text{і} \quad (3.74)$$

$$\frac{dC_{ihydr}}{dt} = K_{hydr}^{1} K_{hydr}(T_a) C_i K_{hydr}(W) \quad \text{при} \quad C_i < C_{icrit} \quad (3.75)$$

де K_{hydr}^{0} - константа швидкості реакції нульового порядку; K_{hydr}^{1} - константа швидкості реакції першого порядку; $K_{hydr}(T_a), K_{hydr}(W)$ - функції впливу температури повітря T_a і вологості грунту W на швидкість розпаду; C_{icrit} - критична кількість вуглеводів, що визначать початок реакції розпаду як реакції першого порядку; C_i - кількість вуглеводів тканин, які старіють.

Витрати на *дихання росту і дихання підтримки* моделюються з використанням концепції МакКри та з врахуванням зміни інтенсивності дихання в онтогенезі і під впливом температури повітря:

$$\frac{dR}{dt} = \alpha_R \left[C_G \frac{dm}{dt} + C_m m \varphi_R \right], \qquad (3.76)$$

де C_G - коефіцієнт витрат на дихання росту; C_m - коефіцієнт витрат на дихання підтримки; α_R - онтогенетична крива дихання; dm/dt - приріст біомаси рослин; m- маса рослин; φ_R - температурна крива дихання.

Блок мінерального живлення

Приймається, що формування *фонду вільного азоту* на кожному часовому кроці йде за рахунок поглинання азоту з грунту, продуктів розпаду тканин і витрат на відновлення життєдіяльних структур тканин:

$$\frac{dN_{lab}}{dt} = N_{abs} + N_{hyd} - N_{sen}, \qquad (3.77)$$

де N_{lab} - фонд вільного азоту; N_{abs} - кількість поглиненого з грунту азоту; N_{hydr} - кількість азоту, що утвориться при розпаді білка; N_{sen} - витрати на відновлення білка.

Процес поглинання азоту рослиною з грунту йде активним шляхом і пасивним – виносом азоту з транспіраційною течією.

$$\frac{dN_{abs}}{dt} = \frac{N_{abs}^{\max} \overline{N}_{s.r.} m_r^n}{K_{abs}^N + \overline{N}_{s.r.}} K_{abs}^N(T_s) + T\ \overline{N}_{s.w.}, \qquad (3.78)$$

де $N_{abs}^{\max}$ - максимальна швидкість поглинання азоту коренем; $\overline{N}_{s.r.}, \overline{N}_{s.w.}$ - концентрація азоту відповідно на поверхні коріння і в грунтовому розчині; K_{abs}^N - константа Міхаеліса-Ментен; $K_{abs}^N(T_s)$ - функція впливу температури грунту на швидкість поглинання азоту коренем.

Розпад білка в органах рослини описується рівнянням, аналогічним рівнянням (3.34) і (3.35) Приймається, що швидкість відновлення білка кожного органа рослини пропорційна вмісту азоту в тканинах цього органа:

$$\frac{dN_{isen}}{dt} = \alpha_{sen} N_i, \qquad (3.79)$$

де α_{sen} - відносна швидкість відновлення білка; N_i - вміст азоту в тканинах i-го органа.

Блок росту

Динаміка біомаси надземної і підземної частин рослин та окремих органів визначається з врахуванням потреб цих частин рослин в асимілятах.

Приріст маси знаходиться як сума вільних вуглеводів і азоту:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dC_{lab}}{dt} + \frac{dN_{lab}}{dt}. \qquad (3.80)$$

Розподілення приросту маси між надземною і підземною частинами рослин виконується за допомогою рівняння виду:

$$\frac{dm_{shoot}}{dt} = \beta_{shoot}^{m} \frac{dm}{dt}, \qquad (3.73)$$

$$\frac{dm_{root}}{dt} = \left(1 - \beta_{shoot}^{m}\right) \frac{dm}{dt}, \qquad (3.74)$$

де β_{shoot}^{m} - співвідношення надземної і підземної частин рослин.

Блок накопичення радіонуклідів

Приймається, що *фонд вільних радіонуклідів* у рослині формується за рахунок їхнього надходження кореневим шляхом:

$$\frac{dA_{lab}^{f}}{dt} = A_{r}^{f} \quad \left(f \in {}^{90}Sr, {}^{137}Cs\right), \qquad (3.75)$$

де $\frac{dA_{lab}^{f}}{dt}$ - швидкість надходження радіонуклідів у рослини; A_{r}^{f} - надходження радіонуклідів у рослину кореневим шляхом.

Потік радіонуклідів через поверхню коренів знаходимо за методом В. М. Прохорова [1970]. Корені розглядаються при цьому як поглинаюча площина:

$$\frac{dA_r^f}{dt} = \frac{\overline{A}_{soil}^{f} V^f}{2} \left\{ \frac{2k^f - V^f}{V^f} \exp\left[\frac{\left(k^f - V^f\right)k^f t}{D^f}\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{2k^f - V^f}{2}\sqrt{\frac{t}{D^f}}\right) + 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{V^f}{2}\sqrt{\frac{t}{D^f}}\right) \right\} \qquad (3.76)$$

$$\frac{dA_{lab}^{f}}{dt} = A_{lab}^{f} (f \in {}^{90}Sr, {}^{137}Cs)$$

де $\frac{dA_r^f}{dt}$ - швидкість поглинання радіонуклідів кореневою системою рослин; $\overline{A}_{soil}^{f}$ - вміст радіонуклідів у шарі грунту, де мешкає коренева система; V^f - швидкість конвективного переносу радіонуклідів у грунті під дією потоку вологи, що поглинається рослиною; k^f - коефіцієнт кореневого

поглинання; D^f - коефіцієнт дифузії радіонуклідів у грунті; t - час початку вегетаційного періоду.

Розподіл радіонуклідів між надземною і підземною частинами рослин, листками і пагонами визначається [30] як:

$$\frac{dA^f_{shoot}}{dt} = \beta^{Af}_{shoot} \frac{dA^f_{lab}}{dt}; \tag{3.77}$$

$$\frac{dA^f_{root}}{dt} = (1 - \beta^{Af}_{shoot}) \frac{dA^f_{lab}}{dt}; \tag{3.78}$$

$$\frac{dA^f_{l_{func}}}{dt} = \beta^{Af}_{l} \frac{dA^f_{shoot}}{dt} - \upsilon^{A}_{l} A^f_{l_{func}}; \tag{3.79}$$

$$\frac{dA_{l_{yel}}}{dt} = \frac{dA^f_{l_{func}}}{dt} \quad \text{при} \quad \frac{dm_{l_{func}}}{dt} < 0; \tag{3.80}$$

$$A^f_{l_{mor}}(t) = A^f_{l_{yel}}(t-1); \tag{3.81}$$

$$\frac{dA^f_{s_{gr}}}{dt} = \beta^{Af}_{s_{gr}} \frac{dA^f_{shoot}}{dt} + \upsilon^{Af'}_{l} A_{l_{func}}; \tag{3.82}$$

$$\frac{dA^f_{s_{wood}}}{dt} = \beta^{Af}_{s_{wood}} \frac{dA^f_{shoot}}{dt} + \upsilon^{Af''}_{l} A^f_{l_{func}}. \tag{3.83}$$

$$\upsilon^{Af}_{l} = \upsilon^{Af'}_{l} + \upsilon^{Af''}_{l}, \tag{3.84}$$

де β^{Af}_{shoot} - функція розподілу поглинених рослиною радіонуклідів між надземною і підземною частинами рослин; β^{Af}_{l} - функція розподілу радіонуклідів у листя; $\beta^{Af}_{s_{gr}}$ - функція розподілу радіонуклідів у зелені пагони; $\beta^{Af}_{s_{wood}}$ - функція розподілу радіонуклідів у здеревілі пагони; υ^{Af}_{l} - функція переміщення радіонуклідів із листя при їхньому старінні; $\upsilon^{Af'}_{l}$ - функція переміщення радіонуклідів із листя при їхньому старінні в зелені пагони; $\upsilon^{Af''}_{l}$ - функція переміщення радіонуклідів із листя при їхньому старінні в здеревілі пагони.

Приведена вище система рівнянь описує формування гідрометеорологічного режиму в системі "грунт - рослина - атмосфера", основні процеси життєдіяльності рослин, їхній ріст і накопичення ними радіонуклідів.

3.2.5 Моделювання міграції радіонуклідів по харчових ланцюжках

У моделюванні переносу радіонуклідів по харчових ланцюжках, так само як і у випадку системи "ґрунт - рослина", найбільше застосування знаходять компартментні моделі. Однак якщо при описі міграції в системі "ґрунт - рослина" найбільш розповсюдженним є використання динамічних моделей, у моделюванні міграції по харчових ланцюжках широко застосовуються і статичні моделі [24].

В основі статичних моделей лежить метод коефіцієнтів накопичення. Вони мають найбільш простий вигляд, оскільки в них повністю ігнорується залежність процесів, що протікають в агроценозах, від часу. Параметри, що описують перенесення радіонуклідів у статичних моделях F_{ij} відповідають умовам рівноваги між вмістом радіонуклідів в окремих компартментах і мають сенс частки радіонуклідів, що містяться в j-му компартменті, що надходить у i-й. Такі величини називають коефіцієнтами накопичення радіонуклідів у i-му компартменті.

$$F_{ij} = \int_0^\infty C_i(\tau)d\tau / \int_0^\infty C_j(\tau)d\tau . \qquad (3.85)$$

Використовуючи такий метод, статичні моделі міграції радіонуклідів в агроекосистемах можна представити в такій формі:

$$q_k = \sum \Pi F_{ij} q_0 , \qquad (3.86)$$

де q_k - вміст радіонуклідів у k-му компартменті; q_0 - щільність випадань, ΠF_{ij} - добуток коефіцієнтів накопичення між ланками харчового ланцюга, що закінчується в k -му компартменті.

Підсумовування виконується у всіх ланцюжках, що описують надходження в цей компартмент. Такий підхід дозволяє розкласти складні ланцюги міграції радіонуклідів в агроценозах на окремі харчові ланцюжки і розраховувати надходження радіонуклідів у продукти харчування від кожної з них окремо.

Для опису процесів, що звичайно враховуються в статичних моделях міграції радіонуклідів по харчових ланцюжках, можна використовувати схему, приведену нижче.

$$q_1 = \gamma F_{10} q_0 ; \qquad (3.87)$$

$$q_2 = \gamma F_{20} q_0 ; \quad (3.88)$$

$$q_3 = \gamma F_{30} q_0 ; \quad (3.89)$$

або за більш складною схемою:

$$q_7 = \gamma F_{10} F_{41} F_{74} q_0 ; \quad (3.90)$$

$$q_2 = \gamma F_{10} F_{41} F_{24} q_0 ; \quad (3.91)$$

$$q_3 = \gamma F_{10} F_{41} F_{34} q_0 ; \quad (3.92)$$

Коефіцієнту накопичення F_{10} відповідає частка радіонуклідів, що надходять на поверхню ґрунту. Він визначається процесами первинного затримування радіонуклідів листковою поверхнею і самоочищення біомаси, швидкістю осідання часток та погодними умовами. Коефіцієнти F_{20}, F_{30} – долі радіонуклідів, затриманих листковою поверхнею рослинності, залежать від тих же факторів, що і F_{10}. Коефіцієнт F_{41} описує перехід радіонуклідів на глибину 20-см шару грунту, його величина зв'язана з характеристиками ґрунту, що визначають процес вертикальної міграції радіонуклідів, і видом агротехнічної обробки. При оцінці параметрів F_{24}, F_{34} і F_{54}, які мають значення коефіцієнтів накопичення, звичайно враховуються властивості ґрунту, що визначають біологічну доступність радіонуклідів. У числі таких властивостей часто розглядають pH і гідролітичну кислотність ґрунтів, суму обмінних основ, вміст неізотопних носіїв, біогенних елементів і гумусу в ґрунті.

Потрібно також відзначити, що практично всі ці коефіцієнти залежать від хімічних властивостей радіонуклідів.

При розрахунку надходження радіонуклідів у раціон харчування населення аналізуються харчові звички різних груп населення, методи збереження й обробки продуктів агропромислового виробництва.

Найбільш адекватне застосування статичних моделей для оцінки наслідків хронічних викидів радіонуклідів з постійною потужністю. У цьому випадку вони можуть бути з успіхом використані для ідентифікації критичних радіонуклідів і шляхів забруднення раціону харчування населення, а також для одержання різного роду кількісних оцінок. Однак на практиці потужність викиду радіонуклідів у навколишнє середовище часто істотно варіює. Це приводить до необхідності у визначенні періоду часу, що може бути використаний для осереднення параметрів моделей без порушення коректності застосовуваного методу. Вибір періоду осереднення, що залежить від виду викиду і характеристик навколишнього

середовища, часто породжує серйозні проблеми, що затрудняє використання статичних моделей у цьому випадку.

Як ілюстрацію статичних моделей нижче приведено гіпотетичний випадок безупинного надходження йоду-131 у навколишнє середовище, що приводить до вмісту в приземному шарі атмосфери 1 Бк/м^3 цього радіонукліда. Прийняті для розрахунків параметри концентрування приведені в табл. 3.4.

Таблиця 3.4 - Параметри концентрування ^{131}I, які були використані для ілюстративного розрахунку забруднення харчових ланцюжків у перший рік після початку викиду

Параметр та одиниця вимірювання	Прийняте значення	Спостері-гаємі межі	Параметр та одиниця вимірювання	Прийняте значення	Спостері-гаємі межі
γ, см/с	1	0,1-5	F , доба	$1{,}5\cdot10^{-8}$	$(1{,}2\text{-}2{,}1)\cdot10^{-8}$
F_{10}, доба	1,4	0,1-1,9	F , м^2/кг	0,1	0,034-0,21
F_{20}, доба	9,9	4-55	F , м^2/л	0,38	0,112-2,1
F_{30}, доба	1,3	0,1-3,0			

Примітка. F_{10}, F_{20}, F_{30} – віднесені до швидкості осідання, рівної 1 см/с.

При проведенні розрахунків передбачалося, що початок викиду ^{131}I у навколишнє середовище відповідає початку вегетаційного періоду. Це дозволило при оцінці вмісту цього радіонукліда в надземній біомасі знехтувати його надходження кореневим шляхом (табл. 3.5).

Приведений приклад носить гіпотетичний характер і призначений для ілюстрації можливих результатів, що можуть бути отримані за допомогою статичних моделей. Внаслідок цього співвідношення між рівнями забруднення окремих продуктів не слід зіставляти з реальними даними.

Переходячи до аналізу динамічних компартментних моделей, необхідно відзначити, що з погляду загального підходу моделі переносу радіонуклідів по харчових ланцюжках практично не відрізняються від моделей такого ж типу, що описують міграцію радіонуклідів у системі "ґрунт - рослин".

Таблиця 3.5 - Вміст ^{131}I в компонентах агроценозу, які розраховані за допомогою статичної моделі

Компармент	Номер	Розрахункова концентрація
Надземна частина врожаю продовольчих культур	2	1,2 кБк/м^2
Поверхня грунту під продовольчі культури	1	8,5 кБк/м^2
Корене- і бульбоплоди (підземна частина врожаю)	5	0,1 мБк/м^2
Кормові культури (пасовиська, трави)	3	1,2 кБк/м^2
М'ясо	6	0,1 кБк/кг
Молоко	7	0,4 кБк/л

Так, при моделюванні транспорту радіонуклідів по м'ясному і молочному ланцюжках разом з моделлю переносу в пасовищній рослинності, що є типовою моделлю міграції в системі "ґрунт - рослина", розглядаються моделі міграції радіонуклідів в організмі сільськогосподарських тварин. Повний набір таких моделей, що реалізують з тим чи іншим ступенем деталізації різні шляхи переносу радіонуклідів і функціонуючих у разі потреби в єдиній системі, складають динамічні компартментні моделі, що можуть бути застосовані для прогнозу забруднення раціону харчування населення при будь-яких можливих умовах викиду радіонуклідів у навколишнє середовище.

При цьому для опису вмісту радіонуклідів в окремих компартментах q_i застосовується система диференціальних рівнянь:

$$\frac{dq_i}{dt} = \sum_{j=1}^{15} k_{ji} q_j - \left(\sum_{j=1}^{15} k_{ij} \right) q_i - \lambda q_i + p_i , \qquad (3.93)$$

у яких коефіцієнти k_{ij} відмінні від нуля в тому випадку, якщо на схемі існують відповідні зв'язки між i- і j-м компартментами, λ - постійна радіоактивного розпаду; p_i - надходження радіонуклідів ззовні в i-й компартмент.

Модель яка розглядається, може бути використана для довгострокового прогнозування вмісту довгоіснуючих радіонуклідів у сільськогосподарській продукції, яку одержують в районах розташування ядерно-енергетичних установок типу PWR.

При оцінці параметрів моделі, що були отримані для умов відповідного району Великобританії, у цілому враховуються ті ж процеси, що були описані вище і приймалися до увагу в компартментних статичних моделях.

Для ілюстрації моделей, що відтворюють сезонну динаміку переносу радіонуклідів по харчових ланцюжках, приведена схема міграції, яка являється аналогом схеми, використаної при описі статичних моделей . Динаміка поводження радіонуклідів, відповідна цій схемі, описується наступними диференціальними рівняннями:

$$dq_1/dt = k_{0,1}q_0 + k_{2,1}q_2 - (\lambda_R + k_{1,2} + k_{5,9})q_1 ; \qquad (3.94)$$

$$dq_2/dt = k_{0,2}q_0 + k_{1,2}q_1 - (\lambda_R + k_{1,2} + k_{2,5} + k_{2,6})q_2 ; \qquad (3.95)$$

$$dq_3/dt = k_{0,3}q_0 + k_{4,3}q_4 - (\lambda_R + k_{3,7} + k_{3,8})\, q_3; \qquad (3.96)$$

Коефіцієнт λ_R - постійна радіоактивного розпаду. У цю систему не включені рівняння, що описують змінювання вмісту радіонуклідів у

продуктах харчування в процесі їхнього збереження і переробки, оскільки це є досить складною задачею, що вимагає окремого рішення.

Зміна вмісту ^{131}I у різних компонентах харчових ланцюжків, яка розрахована за допомогою динамічної моделі, для першого річного періоду після початку надходження радіонуклідів представлена на рис. 3.1. Числові значення параметрів переносу приводяться в табл. 3.6.

Таблиця 3.6 - Значення параметрів, які використовувались для розрахунку вмісту ^{131}I у харчових ланцюжках

Параметр і одиниця вимірювання	Використовуємі значення	Спостерігаємі межі	Параметр і одиниця вимірювання	Використовуємі значення	Спостерігаємі межі
$k_{0,1}$ м/доба	778	86-864	$k_{3,4}$ 1/доба	0,14	0,087-0,23
$k_{0,2}$ м/доба	86	0-778	$k_{3,7}$ 1/доба	$9\ 10^{-7}$	$3,8\ 10^{-7}$-$2,4\ 10^{-6}$
$k_{0,3}$, м/доба	777	86-864	$k_{3,8}$ 1/доба	$8\ 10^{-5}$	$2,5\ 10^{-5}$-$4,4\ 10^{-4}$
$k_{0,4}$,м/доба	86	0-778	$k_{4,3}$ 1/доба	$8\ 10^{-5}$	$2\ 10^{-5}$-$8\ 10^{-4}$
$k_{1,2}$ 1/доба	0,14	0,087-0,23	$k_{4,6}$ 1/доба	10^{-4}	0-10^{-4}
$k_{2,1}$ 1/доба	$6\ 10^{-9}$	$8\ 10^{-11}$-$5\ 10^{-7}$	$k_{7,9}$ 1/доба	$3,8\ 10^{-3}$	–
$k_{2,5}$ 1/доба	$6\ 10^{-9}$	$8\ 10^{-11}$-$5\ 10^{-7}$	$k_{8,9}$ 1/доба	2	–
$k_{2,6}$ 1/доба	10^{-4}	0-10^{-4}			

Порівнюючи результати, отримані за допомогою статичної і динамічної моделей на 365-й день після початку викиду, слід зазначити їхню гарну згоду. Це зв'язано з тим, що коефіцієнти концентрування, які використані в статичній моделі, були розраховані інтегруванням та усередненням відповідних параметрів і залежностей динамічної компартментної моделі.

Динамічні компартментні моделі переносу радіонуклідів по харчових ланцюжках, як правило, відносяться до імітаційних моделей. Однак у деяких випадках вони допускають рішення в аналітичному виді, що дозволяє істотно спростити їхнє застосування. Для одержання аналітичних моделей використовуються як класичні методи рішення систем диференціальних рівнянь, так і операційні методи. Зокрема, цим способом були отримані деякі моделі міграції радіонуклідів для випадку глобальних випадань.

3.2.6 Моделювання транспорту радіонуклідів в агросфері

Необхідність у створенні великих імітаційних моделей транспорту радіонуклідів в агросфері в значній мірі зв'язана із широким розвитком ядерної енергетики в регіонах, що є традиційно аграрними. Таких моделей до цього часу розроблено не дуже багато, оскільки створення кожної з них спричиняє необхідність проведення великих дослідницьких програм, пов'язаних їх параметричним (у першу чергу радіоекологічним) забезпеченням і адаптацією до реальних умов. Серед них найбільш відомі

TERRA (Transport of Environmental Released Radionuclides in Agriculture), MARC (Methodology of Assessing Radiological Conse-Sfiienses), розроблені в США, ECOSYS і RADFOOD, створені у ФРН і Ізраїлі [29].

В основі цих моделей лежить модульний принцип побудови. Відповідно до нього програма, що реалізує модель, компонується у виді сукупності блоків (модулів), у рамках кожного з який незалежно розглядаються різного роду процеси, зв'язані з надходженням радіонуклідів у навколишнє середовище. Цей підхід забезпечує необхідну гнучкість у використанні моделей такого класу, оскільки допускає незалежне коректування і заміну підмоделей, використовуваних в окремих блоках, заміну одних блоків іншими, а також виключення окремих блоків, що розширює їхні функціональні можливості.

Важливою особливістю моделей міграції радіонуклідів в агросфері є наявність сполучених з ними інформаційних систем, у яких містяться дані про особливості районів можливого забруднення. Зокрема, у програмі TERRA до складу бази даних входять кліматичні параметри, зведення про структуру землекористування, характерні раціони харчування, демографічна структура населення і деякі інші показники, що в інформаційній системі зв'язані з географічними координатами.

Таким чином, загальну структуру моделей транспорту радіонуклідів можна представити у вигляді сукупності програмних модулів, реалізованих послідовно, і сполученої з ними бази даних, що забезпечує обчислювальний процес необхідною інформацією .

У *першому блоці* за допомогою характеристик викиду і стандартних для розрахункового часу метеорологічних умовах розраховуються перенесення і розсіювання радіонуклідів в атмосфері, динаміка вмісту їх у приземному шарі повітря і щільність випадань на поверхню ґрунту.

На *другому етапі* оцінюються рівні забруднення сільськогосподарської продукції. Для цього використовуються компартментні моделі міграції радіонуклідів по харчових ланцюжках; ці моделі параметризуються на основі інформації, що міститься у базі даних.

Третій модуль призначений для розрахунку вмісту радіонуклідів у раціонах харчування різних груп населення. При цьому враховуються особливості харчування населення, що відноситься до різних вікових груп і рівнів забезпеченості, зведення про імпортовані продукти і демографічну структуру населення.

У найбільш повних моделях, призначених для оцінки наслідків викиду радіонуклідів у навколишнє середовище поряд з міграцією радіонуклідів в атмосфері розглядаються питання, зв'язані з оцінкою наслідків вживання населенням забрудненої продукції і прийняттям оптимальної стратегії, що дозволяє звести ці наслідки до прийнятних меж. Рішення цих питань викликано необхідністю оцінок дозових навантажень на населення районів, що підлягли забрудненню, у яких звичайно враховуються дози зовнішнього опромінення від радіонуклідів, що

знаходяться на поверхні ґрунту й у приземному шарі атмосфери, і дози внутрішнього опромінення від радіонуклідів, що надходять в організм людей по харчовому й інгаляційному шляхах.

Розрахункові дані про дози опромінення за тривалий період часу використовуються в моделях для обчислення збитку здоров'ю населення, що оцінюється за допомогою радіаційно-гігієнічних критеріїв (блок 5) і служить підставою для розробки системи заходів щодо зниження наслідків надходження радіонуклідів у навколишнє середовище (блок 6). При оцінці ефективності цих заходів часто враховуються економічні показники (блок 7), зокрема вартість цих заходів, можливість їхнього здійснення, а також економічні особливості району, дані про які містяться в інформаційній системі. Такий підхід дозволяє для пошуку оптимальної стратегії ліквідації наслідків (блок 8) використовувати стандартні оптимізаційні методи і знайти за їх допомогою (якщо це можливо) раціональні варіанти землекористування, а також розробити захисні заходи, що забезпечують прийнятний ризик від опромінення населення внаслідок радіоактивних випадань.

Оцінюючи значення імітаційних моделей транспорту радіонуклідів в атмосфері, слід в першу чергу відзначити їх функціональність і гнучкість. Вони можуть застосовуватися для нормування викидів радіонуклідів при нормальній роботі підприємств ядерно-паливного циклу (ЯПЦ), використовуватися для оцінки наслідків і розробки систем заходів щодо зниження збитку в різного роду аварійних ситуаціях.

Такі моделі можуть служити інструментом, що дозволяє проводити оптимальний вибір площадок для будівництва нових об'єктів ЯПЦ, оскільки дають можливість одержати попередню комплексну оцінку збитків в результаті аналізу різних варіантів надходження радіонуклідів у навколишнє середовище.

3.2.7 Оцінка доз опромінення населення за рахунок водних шляхів міграції радіонуклідів (моделі, реконструкція доз опромінення і прогнози)

Водний шлях поширення радіонуклідів є домінуючим шляхом переносу радіонуклідів з території зони відчуження ЧАЕС на «чисті» або малозабруднені регіони України. Дніпровська річкова система - найважливіше джерело води для України. Як питну дніпровську воду використовує близько 8 млн. чоловік, продукти поливного землеробства і рибу споживають більш 30 млн. чоловік, що проживають у басейні Дніпра. Річний комерційний вилов риби в Дніпровських водоймищах складає більш 25000 тон.

Забруднення Дніпровського каскаду досить значне. В даний час річний винос ^{137}Cs і ^{90}Sr може досягати, відповідно, 2-4 ТБк і 10-20 ТБк. Ці цифри підтверджують існування в басейні ріки Дніпро сильно забруднених

водозбірних територій, розглянутих як довгострокові джерела надходження ^{137}Cs і ^{90}Sr у ріки Прип'ять і Дніпро. ^{137}Cs, що міститься у воді цих рік, практично, цілком затримується в шести штучних водоймищах Дніпровського каскаду, у той час як розчинні форми ^{90}Sr досягають Чорного моря. Результати оцінки доз опромінення населення, що проживає в басейні середнього і нижнього плину р. Дніпро розглядаються на основі комплексних моніторингових досліджень по проблемі за роки після аварії на ЧАЕС [30].

Моделі формування доз опромінення за рахунок водного фактора

Моделювання переносу радіонуклідів у сільськогосподарських екосистемах виконувалося [27] на основі модифікованої математичної моделі, розробленої для оцінки забруднення сільськогосподарських продуктів в умовах використання радіоактивно забруднених джерел води для поливного землеробства в моделі ECOSYS, запропонованої Muller і Prohl [1993].

Шляхи формування дози. Можна виділити наступні основні шляхи формування доз внутрішнього опромінення населення за рахунок споживання з харчовими продуктами радіонуклідів, що виносяться з водою і розповсюджуються по водяному шляху: питна вода з ріки Дніпро; риба з ріки Дніпро; продукти поливного землеробства, що поширюються по водяному, шляху.

Питне водопостачання населення є одним із критичних шляхів формування дози. Особливе значення цей шлях має для населених пунктів, які забезпечуються водою з відкритих водойм, що зазнали забруднення. Станції водопостачання, як правило, не можуть істотно знизити вміст у воді більшості розчинених радіонуклідів. Помітного зниження можна чекати для радіонуклідів, перенесених на зважених наносах. Досвід Чорнобильської аварії демонструє, що коефіцієнти очищення води на водозборах по цезію і стронцію знаходяться в діапазоні значень від 1,5 - 4. Тому осереднений коефіцієнт очищення питних вод на водозаборах приймався за значенням два.

Добове надходження радіонуклідів на момент часу t з питною водою оцінюється як:

$$A_w(t, \tau) = C_w(t)K_c v_w(\tau), \qquad (3.97)$$

де; $A_w(t, \tau)$ - добове надходження радіонуклідів з питною водою (Бк/доба); τ- вік; $C_w(t)$ -концентрація активності (Бк/л) у воді; K_c - коефіцієнт очищення води на станціях водозабору (0,5); $v_w(\tau)$ - добове споживання води (л/доба).

Добове споживання води для п'яти розглянутих вікових груп складає, відповідно: 0,5; 0,7; 1,0; 1,25; 1,5 л/доба.

Рибальство і риборозведення. Добове надходження радіонуклідів з рибою розраховується як:

$$A_f(t,\tau) = C_f(t)v_f(\tau\tau)K_{f,r}, \qquad (3.98)$$

де $C_f(t)$ - концентрація активності в їстівних частинах риби ; $v_f(\tau)$ - добове споживання риби; $K_{f,r}$ - частка риби, виловленої з р. Дніпро, у раціоні населення.

Значення $v_f(\tau)$ розраховуються по формулі (7.146). Концентрація активності в їстівних частинах риби, у свою чергу, може бути отримана в такий спосіб:

$$C_w(t) = AwK_f\,Tw, \qquad (3.99)$$

де Aw - концентрація радіонуклідів у воді, Бк/л; K_f – коефіцієнт біоакумуляції радіонукліда із річкової води, зв'язаний із трофічними рівнями виду; T - коефіцієнт, що враховує час надходження радіонукліда; w - частка радіонуклідів, депонованих у м'язові тканини.

Використовуються наступні значення добутку K_fTw: для цезію - 1000, для стронцію - 30. Цей коефіцієнт може варіювати в значному діапазоні значень і його уточнення по видах споживаної риби може дещо змінити отримані оцінки.

Поливне землеробство. Накопичення радіонуклідів у рослинах на зрошуваних землях відбувається внаслідок кореневого надходження радіонуклідів, що знаходяться в ґрунті внаслідок первинних випадань Чорнобильського і дочорнобильського походження, радіонуклідів, що привносяться в ґрунт при поливі забрудненою водою, а також унаслідок безпосереднього надходження радіонуклідів з поливної води в листя.

Розрахунок активності, утримуваною наземною частиною рослин при поливі. Сумарна активність,яка утримується наземною частиною рослин при поливі, може бути представлена як

$$A_i = f_{w,i}\,A_w, \qquad (3.100)$$

де A_i - сумарна питома активність на рослині виду i; $f_{w,i}$ - фракція утримання для рослини виду i; A_w - питома поверхнева активність внесена при поливі.

Частка, утримуваних рослиною, радіонуклідів визначається як:

$$f_{w,i} = \frac{LAI_i S_i}{R}\left[1 - \exp\left(\frac{-\ln 2}{3 \cdot S_i} \cdot R\right)\right], \qquad (3.101)$$

де S_i - ефективне утримання води для рослини виду i; LAI_i - поверхня листкової частини рослин, що приходиться на одиницю площі їхнього росту; R - питомий об'єм поливу на одиницю площі листкової поверхні.

У випадку, якщо значення фракції утримання радіонуклідів перевищує 1, значення $f_{w,i}$ приймається рівним 1. Обсяги поливу рослин

наведені в табл. 7.9. Значення ефективного утримання води S_i, які використовуються в моделі, приймалися для ^{137}Cs - 0,2-0,3 мм, а для ^{90}Sr - 0,4-0,6 мм в залежності від виду рослин. Значення *LAI* залежать від пори року. Для кожного виду розглянутих рослин функції *LAI* табульовані. Для трави значення *LAI* простіше виразити через врожайність. Наступна функція представляє залежність *LAI* від врожайності:

$$LAI_q = LAI_{q,max}(l\text{-}exp(\text{-}k\ Y_q), \qquad (3.102)$$

де LAI_q - поверхня наземної частини трави, що приходиться на одиницю площі її виростання; $LAI_{q,max}$ - максимальне значення *LAI* для трави (7 м^2/м^2); *k* - нормалізуючий коефіцієнт, (1 м^2/кг); Y_q - врожайність трави в момент поливу, кг/м^2. Врожайність трави виражаться у вигляді функції часу.

Таблиця 3.7 - Середні по Україні зрошувальні норми (тис.м^3/га за сезон)

Рослина	Зрошувальна норма	***Рослина***	Зрошувальна норма
Трава	0,6-1,5	Кукурудза	1-1,5
Озима пшениця	1-2	Буряк	0,6-1
Яра пшениця	1-2	Картопля	0,6-1
Озимий ячмінь	1-2	Листкові овочі	2-3
Ярий ячмінь	1-2	Плодові овочі	1-1,5
Овес	1-2	Овочі-коренеплоди	0,6-2
Жито	1-2		

Активність рослинних продуктів формується за рахунок безпосереднього надходження радіонуклідів через листя, а також за рахунок кореневого надходження:

$$C_i(t)= C_{i,l}\ (t) + C_{i,r}(t), \qquad (3.103)$$

де $C_i(t)$ - загальна активність у рослині виду *i*, Бк/кг; $C_{i,l}(t)$ - активність в рослині виду *i* від надходження через листя, Бк/кг; $C_{i,r}(t)$ - активність в рослині виду *i* від кореневого надходження, Бк/кг.

Надходження радіонуклідів через листя.

При розрахунку вмісту радіонуклідів у рослинах необхідно розрізняти уживані людиною чи тваринами в їжу цілком (листові овочі, трава і т.д.) і рослини, у яких використовується тільки окрема частина (злаки, картопля і т.д.). Концентрація активності $C_i,l(t)$ у момент *t* після поливу визначається початковою активністю в рослинах, втратами активності за рахунок погодних факторів (дощ, вітер), радіоактивним розпадом, а також ефектом "розведення" унаслідок росту біомаси рослин. Для цілком уживаних у їжу рослин, за винятком пасовищної трави, ріст

біомаси враховується неявно, тому що активність, що поглинається листями, залежить від врожайності. Таким чином, концентрація активності може бути виражена як

$$C_{il}(\Delta t) = \frac{A_i}{Y_i}\exp[-(\lambda_w + \lambda_r)\Delta t], \qquad (3.104)$$

де $C_{i,l}$ *(Δt)* - концентрація активності в рослині виду *i* у період збору врожаю; A_i - загальна питома активність на рослині виду *i*, що залежить від *LA1* даної рослини в момент поливу: Y_i - врожайність рослин виду *i* у період збору врожаю; λ_w - швидкість втрати активності за рахунок впливу погодних факторів; λr - константа радіоактивного розпаду; *Δt*- час, що пройшов з моменту поливу до збору врожаю.

Періоди збору врожаю і врожайність різних культур відомі і задаються. У випадку з пасовищною травою необхідно приймати до уваги те, що період її використання при випасі тварин досить тривалий. При цьому необхідно враховувати явне зменшення концентрації активності через ріст біомаси рослин. Крім того, для цезію-137, що має високу рухливість, істотне переміщення речовин до коренів і наступний їхній перерозподіл:

$$C_{g,l}(t) = \frac{A_g}{Y_g}\{(1-a)\exp[-(\lambda_b + \lambda_w + \lambda_r)t] + a\ \exp[-(\lambda_{t_t} + \lambda_{r_w})t]\} \qquad (3.105)$$

де $C_{gi}(t)$ - концентрація активності у траві в момент *t* після поливу; A_g - загальна питома активність трави; Y_g - врожайність трави в момент поливу; *a* - фракція, яка переходить в кореневу систему; λ_b - швидкість "розведення" внаслідок росту біомаси; λ_i - швидкість падіння активності при переміщенні в кореневу область; *t* - час після поливу.

Таблиця 3.8 - Швидкість "розведення" внаслідок росту біомаси у відповідні періоди напівочищення для трави

Місяць	Швидкість "розведення", доба$^{-1}$	Період напівочищення, Доба
Січень-березень	0,0	–
Квітень	$1{,}65\times10^{-2}$	42
Травень	$3{,}85\times10^{-2}$	18
Червень	$3{,}47\times10^{-2}$	20
Липень	$3{,}65\times10^{-2}$	19
Серпень	$2{,}89\times10^{-2}$	24

Вересень	$2{,}57\times10^{-2}$	27
Жовтень	$1{,}65\times10^{-2}$	42
Листопад-грудень	0,0	–

Як λ_w приймається значення, що відповідає періоду напівочищення в 25 днів. λ_b – сезонно залежна величина, її значення приведені в місячному розрізі в табл. 7.10

Величини λ_w і λ_b дають результуючий ефективний період напівочищення від 10 до 16 днів. Величина λ_t отримана на основі чорнобильських даних і складає $1{,}16\cdot10^{-2}$ доба$^{-1}$ (період напівочищення 60 днів), при значенні фракції $a = 0{,}05$.

Концентрація активності в силосі, одержаному з трави і соломи пропорційна концентрації активності в траві, зібраної з 15 травня по 15 вересня. При цьому приймається: у першій половині цього періоду питома активність силосу дорівнює 70 % питомої активності в траві, а в другій половині – 30 %, що відображує відносний місячний ріст пасовищної трави.

Для рослин, що вживаються в їжу лише частково, необхідно розглянути процес переносу радіонуклідів від листя до їстівної частини рослини. Цей механізм залежить від фізіологічних властивостей розглянутого елемента: він має велике значення при надходженні цезію і практично не впливає на активність у випадку надходження стронцію. В останньому випадку відіграє роль лише безпосереднє надходження в їстівну частину рослини. Крім того, кількість перенесеної активності залежить від тривалості періоду Δt між поливом і збиранням врожаю.

У розглянутій моделі переносу описується коефіцієнт переходу $T_i(\Delta t)$, що являє собою фракцію активності, перенесену від листя до їстівної частини рослини до моменту збору врожаю. Коефіцієнт залежить від елемента, виду рослини, а також часу, що пройшов від поливу до збору врожаю.

Концентрація радіонукліда в рослинах виду i, зібраних через Δt днів після поливу визначається наступною формулою

$$C_{il}(\Delta t) = \frac{A_i}{Y_i} T_i(\Delta t) \exp(-\lambda_r \Delta t), \qquad (3.106)$$

де $T_i(\Delta t)$ - коефіцієнт переходу для рослини виду i; Y_i - врожайність їстівної частини рослини виду i.

Кореневе надходження радіонуклідів. Концентрація радіонукліда в рослинах, утворена кореневим надходженням, розраховується з використанням концентрації радіонукліда в ґрунті і

коефіцієнтів накопичення TF_i, які виражають співвідношення концентрацій активності в рослині (жива вага) і ґрунту (суха вага):

$$C_{i,r}(t) = TF_i\, C_s(t), \qquad (3.107)$$

де $C_{i,r}(t)$ - концентрація радіонукліда у рослині виду i від кореневого надходження в момент t після поливу;- TF_i, - коефіцієнт накопичення в системі "ґрунт - рослина" для рослини виду i; $C_s(t)$ -концентрація радіонукліда у прикореневій області ґрунту в момент t.

Якщо надходження в ґрунт відбувається в період росту рослини, то для кореневого надходження використовується коригувальний коефіцієнт, що зменшує кореневе надходження. Цей коефіцієнт являє собою відношення проміжку часу від поливу до збору врожаю до тривалості вегетації.

Концентрація в прикореневому шарі ґрунту розраховується по формулі:

$$C_s(t) = \frac{A_s}{L\delta}\exp[-(\lambda_s + \lambda_f + \lambda_r)t], \qquad (3.108)$$

де A_s - загальна питома активність на ґрунті; L - глибина прикореневого шару; δ - щільність ґрунту; λ_s - швидкість зменшення активності через переміщення за межі прикореневого шару; λ_F - швидкість фіксації радіонуклідів у ґрунті.

Значення λ_s розраховується за формулою:

$$\lambda_s = \frac{v_a}{L(1 + \frac{K_d\delta}{\Theta})}, \qquad (3.109)$$

де v_a - швидкість просочування води в ґрунті; K_d - коефіцієнт розподілу; Θ - вміст води в ґрунті.

Приймається, що глибина прикореневого шару для ріллі і пасовищ складає відповідно 0,25 і 0,1 метра. Середньорічна швидкість просочування, води передбачається біля 2 м/рік, щільність ґрунту - $1{,}4\cdot10^{-3}$ кг/м^3 і середній вміст води в ґрунті вважається рівним 20 %. Коефіцієнт розподілу K_d для стронцію складає 100 см^3/г, а для цезію – 1000 см^3/г. Швидкість фіксації радіонуклідів в грунті λ_f приймається для цезію - $2{,}2\cdot10^{-4}$ доба$^{-1}$, а для стронцію - $9\cdot10^{-5}$ доба$^{-1}$.

Таблиця 3.10 - Коефіцієнти накопичення ґрунт - рослини TF_i (Бк/кг)/(Бк/кг) і коефіцієнти розподілу K_d (см^3/г) у системі "ґрунт-вода"

Рослина	^{137}Cs	^{90}Sr
Трава	0,05	0,5
Картопля	0,01	0,02
Злаки	0,02	0,03
Листкові овочі	0,02	0,03
Овочі-коренеплоди	0,01	0,02
Плодові овочі	0,01	0,02
Коефіцієнт розподілу	0,001	0,01

Активність, що накопичується в продуктах тваринного походження. Продукти тваринного походження піддаються забрудненню як внаслідок використання забруднених кормів, так і в результаті застосування забрудненої питної води для водопостачання ферм.

Концентрація активності в продукті тваринництва *m* за рахунок корму *k* визначається коефіцієнтом переходу TF_m

$$C_m(t) = TF_m\, C_k(t) Kw_k\, I_{k,m}(t), \qquad (3.110)$$

де $C_m(t)$ - концентрація активності у продукті *m* у момент *T;* TF_m - коефіцієнт переходу для продукту *m* (табл. 3.10); $C_k(t)$ - концентрація активності у кормі *k;* $I_{k,m}(t)$ - добовий раціон корму *k* для тварини *m;* Kw_k - частка корму *k,* вирощеного на поливних землях, у загальному споживанні корму *k.*

У зв'язку з відсутністю детальної інформації, величина Kw_k вважається пропорційною відношенню поливних посівних площ, до загальних посівних площ, на яких вирощується корм *k*:

$$Kw_k = \frac{SwK_{ik}}{S_{ik}}, \qquad (3.111)$$

де *Sw* - загальна поливна площа даного регіону; K_{ik} - частка, зайнята рослиною *i*, з якої роблять корм *k,* на поливних площах даного регіону; $S_{шл}$ - загальна посівна площа рослини *i* для даного регіону.

Таблиця 3.11 Врожайність різних культур в областях басейну Дніпра, ц/га

Область	Зернові і зерно-бобові культури	Пшениця озима і яра	Куку-рудза	Ячмінь озимий і ярий	Картоп ля	Овочі	Цукровий буряк	Плоди і ягоди
Чернігівська	20,3	23,2	33,4	19,9	137	122	233	20,1
Київська	26,6	30,5	39,5	23,3	110	132	269	12,9
Черкаська	28,1	32,9	35,0	25,7	113	120	258	10,6
Полтавська	28,2	31,3	36,7	28,2	93	111	214	30,9
Кіровоградська	26,8	29,3	30,3	28,3	56	87	213	10,4
Дніпропетров-ська	28,4	32,9	24,7	28,1	76	130	229	23,8
Запорізька	25,8	29,2	26,4	22,1	77	119	153	27,5
Херсонська	25,4	28,6	34,5	20,4	69	149	–	25,8
Миколаївська	27,0	29,1	26,3	28,7	67	128	226	9,2
Кримська	30,7	31,0	36,9	30,0	105	169	–	36,4

Таблиця 3.12 - Середні коефіцієнти переходу радіонуклідів з поливних вод у сільськогосподарські рослини 10^{-3} (Бк/кг сирої маси)/(Бк/м^2 угідь), коефіцієнт варіації 50-100 %

Еле-мент	Спосіб поливу	Озима пшениця, зерно	Люцерна, зелена маса	Кукурудза, зерно	Буряк, коренеп лід	Томати, плоди	Огірки, плоди	Капуста, качан
Cs	По борознах	1,0	2,5	0,4	0,6	0,3	0,4	0,5
Cs	Дощування	2,0	6,0	0,6	0,8	0,6	0,6	0,8
Sr	По борознах	3,0	7,0	0,06	0,8	0,3	0,4	0,8
Sr	Дощування	4,0	7,0	0,13	0,8	1,0	0,4	1,0

Таблиця 3.13 - Коефіцієнти переходу корм-продукт TF_m (доба/л, доба/кг)

Продукт тваринного походження	^{137}Cs	^{90}Sr
Коров'яче молоко	$1E^{+00}$	IE^{-01}
Яловичина	$4E^{+00}$	$2E^{-02}$
Курчата	$4E^{-01}$	$3E^{-02}$
Яйця	$3E^{-02}$	$2E^{-02}$

Таблиця 3.14 - Середнє значення коефіцієнтів переходу радіонуклідів із ґрунту в рослини 10^{-3} (Бк/кг)/(Бк/м^2 угідь), коефіцієнт варіації 50 %

Продукція	Дерново-підзолистий піщаний ґрунт		Дерново-підзолистий суглинний ґрунт		Сірий лісовий суглинний ґрунт		Чорнозем звичайний		Чорнозем могутній	
	^{90}Sr	^{137}Cs	^{90}Sr	^{137}Cs	^{90}Sr	^{137}Cs	^{90}Sr	^{137}Cs	^{90}Sr	^{137}Cs
Зерно злакових	3,0	0,81	0,72	0,25	0,16	0,12	0,13	0,062	0,056	0,042
Коренепло-ди		0,30	0,65	0,8	0,30	0,04	0,12	0,02	0,055	0,01
Картопля	2,0	0,30	0,48	0,10	0,11	0,05	0,09	0,03	0,04	0,02
Вегетативна маса польо-вих та овоче-вих культур			2,2	0,35	0,50	0,16	0,40	0,10	0,18	0,07
Сіно природ-них трав	420	13	95	4,4	21	1,9	17	1,1	7,5	0,68

Примітка: величини $I_{k,m}$ - добового раціону приводяться в табл. 3.15.

Таблиця 3.15 - Добові кормові раціони I_{km}

Тварина	Корм	Споживання, кг/доба свіжого продукту
Корова	Трава	50
Свиня	Озимий ячмінь	3
Курка, курча	Озима пшениця	0,09

Активність, що накопичується в продуктах тваринного походження за рахунок споживання води тваринами.

Вагому частку надходження радіонуклідів в організм тварин складає споживання питної води. Особливий вплив цей шлях робить на вміст радіонуклідів у молоці і м'ясі корів, що складають істотну частку харчового раціону людини. Оцінка рівнів забруднення продуктів харчування тваринного походження від пиття води тваринами може розраховуватись за схемою, запропонованою вище.

Надходження активності в організм тварин з питною водою визначається виразом

$$A_m(t) = C_w(t)\, I_{w,m}(t), \qquad (3.112)$$

де $A_m(t)$ - надходження активності в організм тварини m; $C_w(t)$ - концентрація активності у питній воді; $I_{w,m}(t)$ - добовий раціон споживання води для тварини m, л.

Кількість споживаної тваринами води залежить від виду, віку, продуктивності тварин, а також від умов експлуатації, характеру годівлі, метеорологічних умов, температури води, способу поїння, індивідуальних особливостей тварини.

У степових і лісостепових районах місцеві породи великої рогатої худоби споживають води трохи менше, чим передбачене Держстандартом, але при цьому продуктивність їх не знижується. Молодняк сільськогосподарських тварин унаслідок більш інтенсивного обміну речовин споживає води на 1 кг живої ваги в середньому в 2 рази більше, ніж дорослі тварини. У молочних корів потреба у воді збільшується з підвищенням удоїв. Так, корова з удоєм 12 л випиває за добу 35-40 л, а з удоєм 40-45 л - до 110 л води.

На основі отриманої динаміки надходження радіонуклідів в організм тварин з питною водою розраховується вміст активності в продуктах тваринного походження.

Вплив обробки сільськогосподарської продукції на вміст радіонуклідів у продуктах харчування готових до вживання.

Забруднення продуктів харчування і кормів розраховується з урахуванням зміни концентрації в процесі обробки і готування, а також часу обробки і збереження. Концентрацію активності в продукті k одержують з концентрації активності в сирому продукті по формулі:

$$C_k(t\} = C_{k0}(t-t_{pk})P_k\ , \qquad (3.114)$$

де $C_k(t)$ - концентрація активності у готовому до вживання продукті k у момент t; $C_{k0}(t)$ - концентрація активності у сирому продукті в момент t; P_k - коефіцієнт зміни активності при готуванні продукту k;

Коефіцієнти зміни активності радіонуклідів при приготуванні продуктів приведені в табл. 3.17. При переробці молока зміна концентрації кінцевого продукту не приймається до уваги.

Надходження радіонуклідів в організм людини. Рівень надходження радіонуклідів в організм людини розраховується через залежні від часу питомі активності продуктів харчування та обсяг їхнього споживання людиною:

$$A_h(t,\tau) = \sum_k C_k(t) v_{k(\tau)} K w_k\ , \qquad (3.115)$$

Таблиця 3.16 - Середньодобові норми споживання води тваринами (у літрах на 1 голову)

Вид тварин	На фермах		На пасовищах	
	з водопро-водом	без водопро-воду	нормальні райони	пустельні райони
Корови при ручному доїнні	90	70	60-70	50-60
Корови при машин-ному доїнні	115	95	–	–
Недійні корови	60	50	50	45
Телята 4-6 місяців	20	18	–	–
Молодняк до 2-ох років	35	30	35	30

Таблиця 3.17 - Коефіцієнти зміни активності при обробці та приготуванні продуктів

Оброблюваний продукт	Коефіцієнт зміни, концентрація в сирому продукті = 1		
	^{90}Sr	^{137}Cs	Інші
Пшеничне борошно	0,5	0,5	0,5*
Пшеничні висвіки	3	3	3**
Житнє борошно	0,5	0,6	0,5*
Житні висівки	3,5	2,7	3**
Очищена картопля	0,8	0,8	0,8
Овочі	0,8	0,8	0,8
Олія	0,2	0,2	1
Вершки, 30% жирності	0,4	0,7	1
Згущене молоко	2,7	2,7	2,7
Сир	0,8	0,6	1

Примітка: *для *Pu* приймається значення 0,2; **для *Pu* приймається значення 4.

де $A_h(t)$ - швидкість надходження радіонуклідів з їжею; $C_k(t)$ - концентрація активності у продукті k; $v_k(\tau)$ - добовий раціон; τ - вік людини в момент часу t; Kw_k - частка продукту рослинного походження k, вирощеного на поливних землях, у загальному споживанні продукту k людиною (для продуктів тваринного походження k = 1, тому що для цих продуктів коефіцієнт Kw_k враховується у формулі (3.141).

У даній методиці використовуються вік - залежні добові раціони $v_k(\tau)$. Вони можуть бути розраховані як:

$$v_k(\tau) = K_k(\tau)\frac{S_k \sum_\tau N(\tau)}{\sum_\tau K_k(\tau)N(\tau)}, \qquad (3.116)$$

де $K_k(\tau)$ - частка продукту k у раціоні вікової групи τ стосовно споживання продукту k дорослими (значення для дорослих = 1); S_k - сумарне споживання продукту k усіма віковими групами; $N(\tau)$ - кількість людей у віковій групі τ.

Реконструкція і прогноз доз опромінення населення в басейні ріки Дніпро

Одним із серйозних наслідків аварії на ЧАЕС, є винесення р. Дніпро радіонуклідів з територій з високою щільністю радіоактивного забруднення і їхнє поширення на малозабруднені території. Ця обставина частково розширює масштаби аварії і має потребу в кількісній оцінці рівнів опромінення людей, що проживають у басейні р. Дніпро за межами 30-ти кілометрової зони. Оцінка доз за рахунок водяного шляху поширення радіонуклідів на основі вимірів вмісту радіонуклідів в елементах раціону надзвичайно утруднена через значні масштаби аналізованої території. Крім того, практично неможливо сепарувати шляхи забруднення елементів раціону, застосовуючи лише дані про концентрацію в них радіонуклідів.

Довгостроковий прогноз процесів дозоутворення виконується на основі фактичних даних моніторингу вмісту радіонуклідів у воді, довгострокового гідрологічного сценарію р. Дніпро і моделей переносу радіонуклідів у харчових ланцюгах. У моделях використовується вся доступна інформація про особливості сільськогосподарського виробництва, структури поливних площ, вилову риби і питного водопостачання.

Виконаний аналіз доз являється основою для формування концепції водоохороних заходів у зоні впливу аварії на ЧАЕС.

Структура формування дози внутрішнього опромінення. Дози внутрішнього опромінення населення басейну ріки Дніпро обумовлені як первинним радіоактивним забрудненням територій, так і опроміненням за рахунок водокористування, тобто за рахунок радіонуклідів, що містяться в питній воді, рибі, що виловлюється з дніпровських водосховищ, а також радіонуклідів, що переходять у сільськогосподарську продукцію при використанні дніпровської води для зрошення і водопою худоби. Основними радіонуклідами, що визначають дозу внутрішнього опромінення по водяному шляху на ранній фазі аварії є ^{131}I, а також ізотопи цезію і стронцію, а на пізній фазі - ^{137}Cs і ^{90}Sr.

Оцінка доз опромінення щитовидної залози від радіоактивного йоду в даний час становить інтерес, в основному для епідеміологічних досліджень. По-перше, ця проблема стосується лише початкового періоду

аварії. По-друге, ця доза не може враховуватися при плануванні охоронних заходів у майбутньому, оскільки вона вже реалізована і, отже, нею неможливо керувати.

Дозами, сформованими ізотопами трансуранового ряду можна знехтувати, через їхні низькі концентрації і низьку розчинність їхніх з'єднань. Дози зовнішнього опромінення визначаються часом перебування людини в забруднених радіонуклідами місцях. При розгляді доз за рахунок водяного фактора в більшості випадків дози зовнішнього опромінення незначні в порівнянні з дозами внутрішнього опромінення.

Таким чином, задача оцінки внеску водокористування у формування дози опромінення населення складається з декількох самостійних задач:

– оцінка доз внутрішнього опромінення населення за рахунок використання для пиття води з дніпровських водоймищ;

– оцінка доз внутрішнього опромінення населення за рахунок споживання риби з дніпровських водоймищ;

– оцінка доз внутрішнього опромінення за рахунок споживання сільськогосподарської продукції, вирощеної в районах поливного землеробства при використанні води для поливу з дніпровських водоймищ і для водопостачання ферм.

Принципи розрахунку доз. Деякі пояснення необхідно зробити у відношенні терміна "доза опромінення населення". Як правило, у будь-який досить великій вибірці осіб спостерігається лог-нормальний закон розподілу індивідуальних доз. При цьому на фоні великої кількості людей з відносно невеликими дозами можна зустріти "рекордсменів" з найбільшими дозами. Ці особи складають критичну групу населення.

Принциповим є співвідношення величини середньорічної потужності дози і величини очікуваної дози опромінення. Для ^{137}Cs доза внутрішнього опромінення після одноразового надходження радіонукліда реалізується в значній мірі в межах одного року, тому динаміки середньорічної потужності дози й очікуваної річної дози, практично, повторюють динаміку вмісту ^{137}Cs у раціоні. Для ^{90}Sr накопичення дози відбувається протягом усього життя. Навіть після припинення його надходження в організм, буде відбуватися опромінення кісткової тканини за рахунок ^{90}Sr, що відклався в скелеті.

Оцінка параметрів опромінення населення, сформованих за минулий після аварії період, не викликає принципових труднощів. У той же час, прогноз дози за рахунок надходження радіонуклідів у майбутньому істотно ускладнений, оскільки для цього необхідно обґрунтувати найбільш ймовірну модель прогнозу.

Важливим моментом є вибір групи населення, для якої оцінюється величина колективної дози.

Дози внутрішнього опромінення розраховувалися для населення областей України, що примикають до Дніпровського каскаду і для

Республіки Крим, населення якого використовує воду з Каховського водосховища.

Структура й обсяги водокористування в басейні р.Дніпро представлені в табл. 3.18.

Таблиця 3.18 - Водокористування у Дніпровському каскаді

Область	Ріки і водоймища	Населення, $\times 10^6$	Населення, що викорис-товує Дніпро-вську питну воду, $\times 10^6$	Зрошувані площі га$\times 10^3$	Загальна площа с/г угідь, га$\times 10^3$
Чернігівська	Дніпро і Десна	1,4	–	6	2034
Київська	Київське і Канівське	4,5	0,75	116	1670
Черкаська	Кременчуцьке	1,5	0,2	66	1420
Кіровоград-ська	Кременчуцьке	1,2	0,4	56	2015
Полтавська	Кременчуцьке	1,7	0,3	57	2086
Дніпропетровська	Дніпродзержинське Запорізьке Каховське	3,8	2,0	254	2387
Запорізька	Каховське	2	1,0	272	2225
Миколаїв-ська	Каховське	1,3	0,4	190	1953
Харківська	Дніпродзержинське	3,2	0,4	–	–
Луганська	Дніпродзержинське	2,9	0,1	–	–
Донецька	Дніпродзержинське	5,3	2,2	–	–
Херсонська	Каховське	1,2	–	464	1932
Крим	Каховське	2,5	0,5	390	1748
Усього		32,5	8,1	1871	19470

Імітиційно-стохастичний сценарій вмісту радіонуклідів в воді Дніпра. В основу довгострокового гідрологічного сценарію були покладені усереднені за періодах у три місяці обсяги стоку Дніпра і його притоків, зафіксовані починаючи з 1895 р. Періоди 1970-1992 рр. (високий стік) і 1912-1950 рр. (низький стік) стали шаблоном для побудови прогностичного сценарію. Прогноз концентрації радіонуклідів до 2001 року був виконаний фахівцями УкрНДГМІ на основі спостерігаємих кореляційних зв'язків концентрації радіонуклідів з обсягом стоку. Передбачалося, що протягом цього періоду кількість водообмінних форм ^{90}Sr буде залишатися постійним за рахунок конкуренції процесів розпаду ^{90}Sr і його вилужування з паливної матриці. Після 2001 року в розрахунку використовувався поправочний експонентний множник, з періодом, рівним подвоєному фізичному періоду напіврозпаду ^{90}Sr. Середні за квартал

концентрації ^{90}Sr складуть у 2056 році 0,1-0,2 Бк/л. Створений сценарій вмісту ^{137}Cs і ^{90}Sr у воді водоймищ Дніпровського каскаду був використаний для аналізу доз опромінення населення.

Статєво-вікова структура населення регіонів Дніпровського басейну приведена в табл. 3.19.

Таблиця 3.19 - Чисельність населення областей басейну р. Дніпро на 01.01.1992 р.

Область	Від 1до 2 років	Від 2до 7 років	Від 7 до 12 років	Від 12 до 17 років	Дорослі
Чернігівська	31851	91010	90023	90584	1077197
Київська	117506	331162	326605	318549	3407819
Черкаська	38912	105647	101303	104901	1158351
Полтавська	42952	120248	114013	117667	1343154
Кіровоградська	321095	88948	83893	84970	930652
Дніпропетров-ська	98363	287685	273048	270244	2932633
Запорізька	53754	154723	148573	148110	1571070
Херсонська	36469	100793	97190	96046	919193
Миколаївська	37109	106867	100649	99560	986422
Кримська	68379	198054	190058	184347	1895634

Питне водопостачання населення. Дніпровський каскад є джерелом питної води для більш ніж 8 млн. чоловік. Основними споживачами питної води з р. Дніпро є Дніпропетровська і Донецька області. У м.Київ Дніпровську воду як питну використовує близько 750 тис. чоловік. З огляду на близькість київських водозаборів до первинного джерела забруднення, Київ є одним із критичних населених пунктів, стосовно забруднення радіонуклідами питної води. У розрахунках використовувалася наступна вікова залежність споживання питної води: 3 місяці - 0,2 л/доба; рік - 0,5 л/добу; 5 років - 0,7 л/добу; 10 років - 1,0 л/добу; 15 років - 1,25 л/добу, дорослі -1,5 л/добу.

Коефіцієнт очищення питної води для ^{137}Cs і ^{90}Sr був прийнятий рівним 2.

Оцінка річної ефективної дози (РЕД) за рахунок ^{131}I у водопровідній воді м. Києва була виконана на основі даних прямих вимірів проб води Київського водосховища. Вона склала в 1986 році порядку 100 чол.-Зв для населення 750 000 чоловік.

Комерційний вилов риби. Дніпровський каскад водоймищ інтенсивно використовується для комерційного вилову риби. Річний обсяг вилову складає більш 25000 тон. Якого-небудь істотного зменшення обсягу вилову після Чорнобильської аварії не відзначено. Прогноз рівнів змісту

радіонуклідів у рибі виконаний з використанням простих моделей біоакумуляції.

Водокористування в сільському господарстві. В басейні Дніпра зрошується більше чим 1,8 млн. га сільськогосподарських угідь. При цьому 72 % з них зрошується водами Каховського водосховища (див. табл. 3.18). Близько 50 % зрошуваних площ використовується для вирощування кормів. Овочеві культури займають менше 10 % усіх площ.

Накопичення радіонуклідів у рослинах на зрошуваних землях відбувається внаслідок кореневого надходження радіонуклідів, що знаходяться в ґрунті внаслідок первинних випадань Чорнобильського і дочорнобильского походження, радіонуклідів, що привносяться в ґрунт при поливі забрудненою водою, а також внаслідок безпосереднього надходження радіонуклідів з води в листя.

Продукти тваринного походження піддаються забрудненню як унаслідок використання забруднених кормів, так і в результаті застосування забрудненої питної води для водопостачання ферм.

Найбільші рівні концентрацій спостерігаються для овочів, хлібопродуктів, молока і картоплі.

Розрахунки виконані для випадку відсутності водоохоронних заходів. Як видно з представлених результатів, ^{90}Sr є ведучим дозоутворюючим фактором при водяному шляху поширення радіонуклідів. Доза, сформована їм, може перевершувати дозу за рахунок ^{137}Cs у 2-35 разів. Величина співвідношення визначається, у першу чергу, структурою водокористування, особливостями структури поливних площ.

Північні райони Київської області не враховані через відсутність водокористування з р.Дніпро

Отримані оцінки показують, що у випадку Чорнобильської аварії водяний шлях формує лише незначну частку сумарної дози опромінення населення за рахунок усіх дозоутворюючих факторів. Роль кожного з трьох основних шляхів формування дози (продукти поливного землеробства, питна вода з ріки Дніпро, риба з ріки Дніпро) істотно залежить від розглянутого регіону і визначається, головним чином сформованою структурою водокористування.

Таблиця 3.20 - Колективна інтегральна очікувана ефективна доза ($КІЕД_{70}$),сформована ^{90}Sr і ^{137}Cs, що виносяться р. Прип'ять при відсутності водоохоронних заходів

Область	Населення, млн. чол.	^{90}Sr, $КІЕД_{70}$ за рахунок водокористування чол.3в	^{137}Cs, $КІЕД_{70}$ за рахунок водокористу-вання, чол.3в	Відношення ^{90}Sr $КІЕД_{70}$/ ^{137}Cs $КІЕД_{70}$
Чернігівська	1,4	4	2	2
Київська*	4,5	290	190	1,5
Черкаська	1,5	115	50	2,3

Кіровоградська	1,2	140	40	3,5
Полтавська	1,7	130	60	2,2
Дніпропетров-ська	3,8	610	75	8
Запорізька	2	320	35	9
Миколаївська	1,3	150	20	8
Харківська	3,2	60	4	15
Луганська	2,9	15	1	15
Донецька	5,3	330	20	17
Херсонська	1,2	100	20	5
Крим	2,5	175	5	35
Всього	32,5	2500	500	5

Північні райони Київської області не враховані через відсутність водокористування з р.Дніпро

Отримані оцінки показують, що у випадку Чорнобильської аварії водяний шлях формує лише незначну частку сумарної дози опромінення населення за рахунок усіх дозоутворюючих факторів. Роль кожного з трьох основних шляхів формування дози (продукти поливного землеробства, питна вода з ріки Дніпро, риба з ріки Дніпро) істотно залежить від розглянутого регіону і визначається, головним чином сформованою структурою водокористування.

3.3 Математичне моделювання процесу поглинення важких металів грунтом та рослинами

3.3.1 Основні характеристики грунту, які обумовлюють поглинання важких металів

Ґрунт - це дуже специфічний компонент біосфери, оскільки вона не тільки акумулює компоненти забруднень, але і виступає як природний буфер, що контролює переніс хімічних елементів і з'єднань в атмосферу, гідросферу і живу речовину. Мікроелементи, що надходять з різних джерел, потрапляють в остаточному підсумку на поверхню ґрунту, і їхня подальша доля залежить від її хімічних і фізичних властивостей. Тривалість перебування забруднювальних компонентів у ґрунтах, особливо важкими металами, практично вічно. Метали, що накопичуються в ґрунтах, повільно віддаляються при споживанні рослинами, ерозії і дефляції. Перший період напіврозпаду важких металів для ґрунтів в умовах лізиметра сильно варіює: для Zn (від 70 до 510 років), для Cd (від 13 до 1100 років), для Cu (від 310 до 1500 років) і для Pb (від 740 до 5900 років).

Концентрація мікроелементів у поверхневому шарі ґрунтів у глобальному масштабі зростає з розширенням індустріальної і сільськогосподарської діяльності. Є ознаки того, що поверхневий шар

ґрунтів піддається як локальному забрудненню, так і регіональному переносу забруднень.

Регіональне забруднення ґрунтів відбувається головним чином у промислових районах і центрах великих населених пунктів. Найбільш важливими джерелами мікроелементів тут є підприємства, транспорт і комунальні стічні води.

Одночасно з повітряними джерелами мікроелементів слід зазначити надходження останніх у ґрунти з добривами, пестицидами і при зрошенні.

Важливим джерелом забруднення ґрунтів у деяких промислових районах можуть бути відвали металургійних заводів і рудників за рахунок мобілізації і переносу важких металів, що просочується через них чи водою розносу пилу вітром. Тривале використання неорганічних фосфатних добрив істотно підвищує природний рівень Cd і F у ґрунтах, тоді як для інших елементів, наприклад As, Cr, Pb і V, він помітно не зростає. Вплив зрошення стічними водами на склад ґрунтів викликає особливо серйозне занепокоєння, воно було предметом великого числа досліджень і багатьох законодавчих мір. Утім, потрібно брати до уваги, що при встановленні припустимих меж варто враховувати не тільки властивості даної системи рослини (ґрунт, але також співвідношення між окремими хімічними елементами і їхнім загальним навантаженням на ґрунт).

Заражені важкими металами ґрунту здатні давати нормальні на вид злаки, що можуть бути небезпечні для людей і тварин. Тому безпечне використання стічних вод при поливі повинне визначатися по безпечному рівні надходження мікроелементів у ґрунти.

Припустимі рівні вмісту мікроелементів, особливо важких металів у ґрунтах сільськогосподарських угідь, можна обчислити за допомогою різних факторів. Найбільше важливо, однак, оцінювати застосовувані норми в наступних аспектах:

1. Вихідний вміст мікроелемента в ґрунті.
2. Загальна добавка по кожному з елементів і по усіх важких металах.
3. Кумулятивне загальне навантаження важких металів.
4. Органічні дози важких металів.
5. Рівноцінність мікроелементів за таксичністю дії на рослини.
6. Граничні значення концентрацій мікроелементів у ґрунтах.
7. Відносні кількості взаємодіючих між собою елементів.
8. Характеристики ґрунту: pH, карбонатність, кількість органічної речовини, вміст глинистої фракції і вологість.
9. Баланс привносу - виносу.
10. Чутливість рослин.

Розходження типів ґрунтів, видів рослин і умов росту приводять до того, що забруднення ґрунтів по-різному може впливати на стан мікроелементів у рослинах. Деякі автори використовують поняття

«опірність ґрунтів до забруднення важкими металами». Вона визначається по критичних рівнях вмісту металів - забруднень, при яких у рослинах в цілому виявляються ефекти токсичності, і тісно зв'язана з катіонообмінною ємністю ґрунтів. Звичайно опірність некислого важкого ґрунту з високим вмістом органічної речовини в кілька разів вище, ніж у легкою піщаною килою ґрунту. Суглинні нейтральні ґрунти можуть накопичувати великі кількості мікроелементів з меншим ступенем ризику для середовища. Однак загальна хімічна нестійкість таких ґрунтів звичайно приводить до зниження біологічної активності.

3.3.2 Морфологічні характеристики рослин, які обумовлюють швидкість поглинання важких металів

Найбільш небезпечними для живих організмів та рослин є такі важкі метали як свинець, ртуть, кадмій, миш як, цинк, нікель та інші забруднювальні елементи. Біля 90 % важких металів, потрапляючи у навколишнє середовище, акумулюються грунтом. Потім вони мігрують у природні води, поглинаються рослинами і потрапляють у харчові ланцюжки.

Свинець, ртуть, кадмій, миш як, цинк вважаються головними забруднювачами головним чином тому, що техногенне їх накопичення у навколишньому середовищі йде особливо високими темпами. Данні елементи володіють великим юродством з фізіологічно важливими з єдненнями та можуть придушувати найбільш значні процеси метаболізму, припиняють ріст та розвиток.

Припустима кількість важких металів, яку людина може споживати з продуктами харчування без ризика для життя коливається в залежності від виду метала у межах: свинець – 3 мг, кадмій – 0,4...0,5 мг, ртуть – 0,3 мг в неділю. Хоч ці рівні умовні, вони служать основою для контролю утримання важких металів у продуктах харчування.

У живих організмах важкі метали відіграють особливу роль. У малих концентраціях вони входять у склад біологічно активних речовин, які регулюють нормальний хід процесів життєдіяльності. Порушення у випадку техногенного забруднення концентрацій, які еволюційно склалися, приводить до негативних а де коли до катастрофічних наслідків для живих організмів. Важкі метали, які потрапили до організму людини накопичуються переважно у печінці та виводяться з організму край повільно.

Потрапляючи у рослини, важкі метали розподіляються в їх органах та тканинах край нерівномірно. Тому, вивчення особливостей акумуляції важких металів в рослинах може допомогти обмежити їх потрапляння в організм людини.

Частіше кореневі системи рослин утримують більше цинку, ніж надземні органи. У надземних органах цинк концентрується переважно у старих листях. Корені пшениці відрізняються більш високим утриманням

свинцю та кадмію у порівнянні з листям. Рівень накопичення важких металів в репродуктивних органах рослин значно нижчий, ніж у вегетативних, та залежить від біологічних особливостей культури, фізіологічної ролі елемента, його утримання в грунті та приступності для рослин. Це можна вважати позитивним фактом, тому що саме вони складають господарсько важливу частину основних овочевих культур.

Механізми поглинання, транспорту, метаболізму та розподілу важких металів в органах та тканинах тісно пов язан з видовими та сортовими особливостями культур, які вирощуються, на які впливають екологічні та антропогенні фактори. Знання про закономірності розподілу важких метал ліву тканинах та органах рослин дають можливість визначити механізми їх перерозподілу та акумуляції у процесі розвитку рослин, розробити достовірні методи оцінки якості врожаю, вірно сертифікувати продукцію.

Знання особливостей розподілу важких металів в рослинах має інтерес для користувачів, тому що дозволяє раціонально використовувати продукцію в процесі технологічної переробки та при використанні у сирому вигляді.

Накопичення та розподіл важких металів в органах рослин залежить на перед усе від виду, фізіологічної спеціалізації та морфологічних ознак окремих органів (тип листя, розмір черешків і прожилок, розмір центрального циліндру у коренеплодах).

У коренеплодах моркви утримання важких металів (крім заліза) зменшується від кінчика до головки. Для заліза характерно високе утримання у головці та рівномірний розподіл у других частинах коренеплоду. У центральній частині коренеплоду спостерігається підвищена кількість цинку та свинцю, а у корці - підвищена кількість міді, марганцю, кадмію та заліза.

Мінімальна кількість кадмію, цинку та свинцю знаходиться у м’якоті бульби картоплі. Підвищена кількість заліза характерна для перефірійної частини бульби. Мідь розподілена рівномірно у всіх частинах бульби.

Капуста відрізняється від інших овочевих культур та картоплі підвищеним утриманням цинку та низьким – кальцію.

Для зелених культур характерно більш високе утримання свинцю в черешках, ніж у листових пластинах. Рослини салату відрізняються найбільш високим утриманням свиню у коріннях, тоді коли рослини петрушки та хріну – найменшим. Серед зелених культур найбільша кількість свинцю у всіх органах рослини спостерігається в укропі, щавелі, салаті.

3.3.3 Розрахунок швидкості поглинання та міграції важких металів у грунті і рослинах

Накопичення важких металів рослиною розглядається в залежності від утримання рухомих форм важких металів у грунті. Швидкість надходження важких металів у рослину описується формулою:

$$\frac{\Delta A_q^{погл(о)}}{\Delta t} = \frac{86{,}4\alpha_q^{погл}\overline{A}_q^{почв}m_r^j}{a_r} \qquad (3.117)$$

де $\frac{\Delta A_q^{погл}}{\Delta t}$ – швидкість поглинання рухомих форм важких металів g-го виду важких металів корінням рослини , мгм $^{-2}$доб$^{-1}$;

$\alpha_q^{погл}$ – поглинальна здібність кореню, мс$^{--1}$;

$\overline{A}_q^{почв}$ – концентрація рухомих форм g-го виду важких металів у грунті, мг кг$^{-1}$;

a_r – радіус кореню., см;

q – вид важкого металу.

3.3.4 Розрахунок коефіцієнту токсичності важких металів для рослин

У зв'язку з можливим підвищенням рівню антропогенного забруднення грунту та рослин важкими металами врахуємо їх фітотоксичний вплив за допомогою коефіцієнту фітотоксичності $К_{ВМ}$, визначеного за принципом Лібіха з великої кількості коефіцієнтів фітотоксичності кожного виду важких металів

$$K_{m.M}^j = \min\left\{K_q^j\right\}, q \in Cd, Cu, Hg, Pb, Sr, Zn \qquad (3.118)$$

кожний з яких визначається з виразу:

$$K_q^{крj} = 1 - \left(\frac{?Aq}{A_q^{кр2} - A_q^{кр1}}\right) \cdot A_q^{рос(j)} \qquad (3.119)$$

де ?Aq - зниження продуктивності рослин в інтервалі критичних величин концентрації важких металів у рослині $A_q^{лз1}$и$A_q^{лз2}$(мг кг$^{-1}$).

3.4 Математичне моделювання впливу осолонцювання та засолення грунту на розвиток рослин

3.4.1 Моделювання впливу осолонцювання грунту на ріст і розвиток та на їх екологічну чистоту

Територія України відноситься до територій з недостатнім або нестійким режимом зволоження грунту. Тому виробництво сільськогосподарської продукції вимагає застосування зрошення для отримання достатньої кількості, якості та екологічної чистоти врожаїв. Але

зрошення в деяких випадках веде до осолонцювання та засолення грунту. Тому з екологічної точки зору дуже важливо ураховувати забруднення грунту внаслідок зрошування.

Засолення грунту, як відомо, уявляє собою збільшення утримання у ньому легкорозчинних солей (карбонату натрію, хлоридів, сульфатів). Якщо процес засолення обумовлений засоленістю грунтоутворюючих порід, привносом солей грунтовими та поверхневими водами, тоді засолення називають первинним або вторинним.

Процес осолонцювання уявляє собою утворення солодей з солонців шляхом деградації останніх в результаті заміщення обмінного Na^+ на H^+. Воно обумовлено натрієво-кальцієвим потенціалом зрошувальної води.

Процес засолення грунту обумовлений кількістю мінеральних солей, які знаходяться у зрошувальній воді, тобто значенням її мінералізації.

Вплив осолонцювання грунту на формування врожаю сільськогосподарських культур враховується за допомогою функцій впливу рівню натрієво-кальцієвого потенціалу грунту на приріст рослинної маси:

$$K^{j}_{Na-Ca} = 1 - (0{,}31 P^{почв(j)}_{Na-Ca} - 0{,}4)?\ ^{j}TSL^{j} n^{j} \qquad (3.120)$$

де K^{j}_{Na-Ca} – функція впливу натрієво-кальцієвого потенціалу грунту на приріст сухої біомаси цілої рослини, безрозмірна;

$P^{почв(j)}_{Na-Ca}$ – натрієво-кальцієвий потенціал грунту, безрозмірний;

? – потенціальна інтенсивність росту рослин, безрозмірна;

TSL – середня за декаду ефективна температура, ^{0}C

n – кількість днів у розрахунковій декаді.

Приймається, що величина натрієво-кальцієво потенціалу грунту не змінюється до поливу:

$$P^{грун\ (j+1)}_{Na-Ca} = P^{грун\ (j)}_{Na-Ca}, \quad при\ X=0. \qquad (3.121)$$

В декаду вегетаційного поливу ця характеристика визначається нами в залежності від рівня натрієво-кальцієвого потенціалу зрошуваної води та внесення фосфогіпсу

$$P^{грун\ (j)}_{Na-Ca} = (1{,}25\ P^{зр.в.(j)}_{Na-Ca} - 0{,}125)\ K_{Na-Ca}(G_H) K_{Na-Ca}(G_ч) \qquad (3.122)$$

де зр.в.(j)

$P_{Na\text{-}}Ca$ – натрієво-кальцієвий потенціал зрошувальних вод, безрозмірний;

$K_{Na\text{-}Ca}$ (G_H) та $K_{Na\text{-}Ca}$ ($G_ч$) – відповідно, функції впливу внесення кількості (норм) фосфогіпсу та часу внесення фосфогіпсу (прямодія та наслідок), які визначаються як:

$$K_{Na\text{-}Ca}(G_H)=0{,}060\ G_H + 1{,}0, \text{ при} \leq G_H\ 8\ \text{т.га}^{-1} \qquad (3.123)$$

$$1{,}3 \quad \text{при } G_H \text{ ›т.га}^{-1}, \qquad (3.124)$$

$$K_{Na\text{-}Ca}(G_ч)= \quad 1{,}0, \text{ при } G_ч = 2 \text{ роки} \qquad (3.125)$$

$$1{,}25 - 0{,}1\ G_ч\ , \text{ при } G_ч = 2 \text{ роки} \qquad (3.126)$$

де G_H – норма внесення фосфогіпсу, т/га;

$G_ч$ – порядковий номер року після внесення фосфогіпсу.

3.4.2 Моделювання впливу засолення грунту на ріст і розвиток та на їх екологічну чистоту

Зниження продуктивності рослин під впливом засолювання грунту розраховується за допомогою функції впливу міри засолювання грунту на приріст біомаси рослин

$$K_S^j = 1 - q_S(S_{почв}^j - S_{почв}^{кр})?\ ^jTSL^jn^j \qquad (3.127)$$

де K_S^j - функція впливу утримання солей у грунті на приріст біомаси рослин, безрозмірна;

q_s - зниження приросту біомаси на одиничний приріст засолення, безрозмірний;

$S_{почв}^j$ - вміст солей у водній витяжці грунту, гр /л;

$S_{почв}^{кр}$ - критичний рівень засолення, гл $^{-1}$.

У першому приближенні приймається, що утримання солей у водній витяжці грунту до першого вегетаційного поливу зберігається на одному рівні:

$$S_{грун}^{j+1} = S_{грун}^{j}, \quad \text{при } X = 0 \qquad (3.128)$$

Для розрахунку рівня засолення грунту в декаду вегетаційного поливу скористуємось рівнянням, апроксимуючи приведену в графічному

вигляді залежність лінійним рівнянням, для цього введемо функції впливу внесення фосфогіпсу на засолення грунту:

$$S_{грун} = (0{,}086S_{зр.в.} + 0{,}092) \cdot K_S \cdot (G_H) \cdot K \cdot (G_ч) \qquad (3.129)$$

де $S_{зр.\ в}$ – мінералізація зрошувальної води, $гл^{-1}$;

$K_S \cdot (G_H)$ та $K \cdot (G_ч)$ – відповідно функції впливу внесення кількості фосфогіпсу та часу його внесення;

$$K_S(G_H) = 0{,}444G_H + 0{,}7, \text{ при } G_H \leq 9 \text{ т/га} \qquad (3.130)$$

$$3{,}0, \text{ при } G_H > 9 \text{ т./га} \qquad (3.131)$$

$$K(G_ч) = 1{,}0, \text{ при } G_ч \leq 2 \text{ роки} \qquad (3.132)$$

$$K(G_ч) = 1{,}2 - 0{,}45\, G_ч, \text{ при } G_ч > 2 \text{ роки} \qquad (3.133)$$

3.5 Визначення виносу біогенних елементів з сільськогосподарських угідь

3.5.1 Класифікація та характеристики біогенних елементів

Основними джерелами біогенного навантаження у межах аграрних територій є сільськогосподарські угіддя (пашні, сінокоси, пасовища), об’єкти тваринництва, склади мінеральних добрив, а також природній рослинний покрив та атмосферні опади. Ці джерела підрозділяються на розсіяні (дифузійні або площадні) та крапкові (сконцентровані у межах обмеженого простору).

Вплив розсіяних та крапкових джерел біогенного навантаження агро екосистем на забруднення грунтів визначається такими показниками: втрати біогенних речовин у рослинництві та тваринництві, їх змив у випадку ерозійних процесів, виніс живильних речовин з комунально-побутовим стоком сільських населених пунктів, а також їх потрапляння у природне середовище з атмосферними опадами.

Втрати біогенних речовин у рослинництві умовно можна розділити на природні та техногенні. Перші в основному залежать від інтенсивності розораності територій, методів землеробства, кількості мінеральних добрив та об’єму кореневих залишків, які утворюються після збирання врожаю сільськогосподарських культур, а другі – від різних порушень, які трапляються під час внесення та транспортування добрив на сільськогосподарських угіддях.

В разі довготривалого використання великих доз добрив виніс біогенних речовин поверхневим стоком збільшується в наслідок їх накопичення в орному шарі грунту. Аналогічна картина спостерігається при внесенні добрив на мерзлий грунт а також по весні по талому снігу. Це підтверджують приведені нижче данні по виносу біогенних речовин (мг/л) з сільськогосподарських угідь з поверхневим стоком при внесенні 1 кг

діючої речовини на 1га:

Засіб внесення добрив	Азот	Фосфор
Восени під оранку	0,010	0,0013
Восени поверхнево	0,085	0,0310
Восени поверхнево на мерзлий грунт	0,216	0,0510
Восени по талому снігу	0,866	0,5940

Ерозія грунту, яка стимулює виніс біогенних речовин, активно впливає на біогенне забруднення вод в першу чергу фосфором.

3.5.2 Види мінеральних добрив, які містять біогенні елементи

Максимальне поглинання води грунтом відбувається у ранньовесняний період, тому у це період необхідно дуже ретельно контролювати внесення органічних та мінеральних добрив. Аналогічна ситуація складається і восени, коли грунт вільний від рослинності.

Чіткий зв'язок існує між стійкістю агро екосистем та станом водних об'єктів. Кількість води, яка проходить повз грунт змінюється в залежності від гранулометричного складу грунту, вологоутримуючою здатністю грунту. Чим вище родючість грунту та утримання у ньому гумусу, тим більше його гігроскопічність. В той же час, забезпеченість рослин біогенами та вологою у найбільш критичні фази розвитку сприяють максимальному засвоєнню живильних речовин та зниженню їх змиву.

Біогенні елементи поступають у гідрографічну мережу від точечних та площадних джерел, розташованих у прибровочних зонах (до 500 м), улоговин, лощин та балок або у водоохоронних зонах рік.

Розрахунок виносу біогенів з сільськогосподарських угідь (площадні джерела) проводять на основі відомих агрохімічних залежностей, які зв'язують кількість речовин, що виносяться з властивостями грунту, видами та врожайністю сільськогосподарських культур. У таблиці 3.21 приведені значення вмісту біогенних речовин у добривах.

За цими даними видно, що для отримання екологічно чистих врожаїв сільськогосподарських культур необхідно використовувати більше органічних добрив.

Таблиця 3.21 Середній вміст біогенних речовин в добривах, %

Добрива	Азот	Фосфор	Калій
Органічні			
Гній змішаний	0,54	0,25	0,7
Перегній	0,7...2	0,3...1,2	0,9
Торф верховий	0,9	0,1	0,01
Торф низинний	2,0	0,2	0,15
Птичий послід	1,5	1,5	0,9
Каналізаційні стічні води	0,01	0,002	0,004
Торфомінеральні аміачні добрива	0,5	0,3	0,4
Мінеральні			
Суперфосфат	-	18	-
Фосфоритна мука	-	19...30	-
Кісна мука	-	15...30	-
Амофос	11...12	42...44	-
Нітроамофоска	16	16	16

Таблиця 3.22 - Втрати добрив в наслідок порушень технологій їх використання, %

Вид добрива	Рівень технологій		
	Високий	Середній	Низький
Органічні	5	10	20
Мінеральні	2	4	6

3.5.3 Розрахунок виносу біогенних елементів з сільськогосподарських угідь

Розрахункове рівняння для визначення виносу біогенів з грунту по лягає на врожайності сільськогосподарських культур як на інтегральному показнику стану декількох базових факторів (грунт, метеорологічні умови, довготривалість вегетаційного періоду, кількість добрив, які використовуються, засобів їх внесення та ін.).

Питомий винос біогенів з площі, зайнятою *i*–ю сільськогосподарською культурою (R_i), визначають за формулою:

$$R_i = \alpha_N k_i y_i + \alpha_p k_i y_i + \alpha_K k_i y_i \qquad (3.134)$$

де $\alpha_N, \alpha_p, \alpha_K$ – відповідно коефіцієнти виносу азоту, фосфору та калію для різних грунтових умов та сільськогосподарських культур (табл.3.23);

k_i – винос біогенів з урожаю, кг/т (табл 8);

y_i – фактична врожайність сільськогосподарської культури .

Відповідно загальний винос біогенних речовин з водоохоронної зони річки або іншого водного об'єкту визначають за формулою:

$$\sum W_{ПЛ} = \sum_{i=1}^{n} R_i S_i \qquad (3.135)$$

де $\sum W_{ПЛ}$ – загальний винос біогенів з площі водоохоронної зони, кг/у рік;

R_i – питомий винос біогенів з площі, зайнятої сільськогосподарською культурою;

n – кількість сільськогосподарських культур на площі водоохоронної зони;

S_i –площа, яка зайнята сільськогосподарською культурою, га.

Таблиця 3.23 Коефіцієнти виносу біогенних речовин

Культура	Грунти	α_N	α_p	α_K
Озима пшениця	Дерново-підзолисті, Чорноземи звичайні	0,16	0,12	0,07
Озиме жито	Дерново-підзолисті, Чорноземи опідзолені та вилужені	0,11...0,12 0,28	0,10...0,11 0,11	0,01...0,07 0,36
Ярі зернові (колоскові)	Усі грунти	0,12...0,48	0,04...0,12	0,12...0,41
Картопля	Дерново-підзолисті, Чорноземи опідзолені та вилужені	0,21...0,30 0,13	0,17...0,19 0,12	0,32...0,33 0,21
Багаторічні трави	Усі грунти	0,50...0,61	0,15...0,25	0,25...0,60

При розрахунках використовують значення врожайності культури за прогнозом. Площу, зайняту культурою, визначають за фактичними даними господарства про структуру посівів у водоохоронній зоні річки.

Початкову кількість внесених біогенних елементів визначають за формулою:

$$W_{ИСХ} = \sum_{j=1}^{m} \Phi_{M_j} W_{CP_j} \qquad (3.136)$$

де $W_{исх}$ – вихідна кількість внесених у грунт біогенів, кг/рік;

m – кількість видів добрив;

Φ_{M_j} – фізична маса j-го виду добрив, що вносяться,т;

W_{CP_j} – середній вміст біогенних елементів у добриві j-го виду

Таблиця 3.24 - Винос біогенів з грунту з врожаєм сільскогосподарських культур, кг/т

Культура	Грунти	N	P_2O_5	K_2O
Озима пшениця	Дерново-підзолисті,	34,0	9,0	20,0
	чорноземи звичайні, каштанові	29,0	10,0	27,0
Озиме жито	Дерново-підзолисті,	33,0	10,0	25,0
	чорноземи звичайні	24,5	12,0	26,0
Яра пшениця	Дерново-підзолисті,			
	чорноземи звичайні, каштанові	33,0	14,0	26,0
	Дерново-підзолисті,	40,0	11,0	23,0
Ярий ячмінь	чорноземи звичайні	42,0	10,0	32,0
	Дерново-підзолисті	26,0	10,4	17,0
Картопля		30,4	11,4	22,0
	Усі грунти	5,0	1,5	7,0
Кормові культури та багаторічні трави		17,6	6,3	19,5

Фізичну масу добрив розраховують за формулою:

$$\Phi_{M_j} = \sum_{j=1}^{m} S_j N_j \qquad (3.137)$$

де S_j – площа внесення j -го добрива, га;

N_j – норма внесення j-го добрива, т/га.

Підвищенні втрати біогенів можуть спостерігатись при низьких рівнях технологій використовування добрив (табл.10).

Використовуючи дані (табл.10), можна визначити долю втрат біогенних елементів та розрахувати їх сумарний винос з ділянки внаслідок порушень технології ($W_{ПОТ}$, кг/рік) за формулою:

$$\sum W_{ПОТ} = \sum_{j=1}^{m} W_{ИСХ_j} q_j \qquad (3.138)$$

де q_j – доля втрат біогенних елементів в наслідок порушень технології внесення j –го добрива;

$W_{ИСХ_j}$ – вихідна кількість внесення біогенних добрив j–го вида, кг/рік.

Загальна величина виносу біогенів ($W_{об}$, кг/рік) буде складати:

$$W_{об} = \Sigma\, W_{ПЛ} + \Sigma W_{ПОТ}\,, \qquad (3.139)$$

а коефіцієнт витрат

$$\alpha_{ПОТ} = W_{об} \,/\, W_{ИСХ} \qquad (3.140)$$

Питання для самоперевірки до розділу 3.1

1. Що уявляє собою пряма, розсіяна та сумарна радіація?
2. Що таке ФАР, її роль у житті рослин?
3. Як розрахувати сумарну сонячну радіацію?
4. Як розрахувати інтенсивність фотосинтетично активної радіації на верхній межі сівби?
5. Як розрахувати інтенсивність фотосинтезу за оптимальних умов тепло- та вологозабезпеченості і в реальних умовах освітленості?
6. Як розрахувати інтенсивність фотосинтезу в реальних умовах навколишнього середовища, враховуючи вплив температури повітря та вологості грунту на фотосинтез?
7. Чим обумовлено послаблення ФАР у рослинному покриві?
8. Як розрахувати ФАР у посіві?

Питання для самоперевірки до розділу 3.2

1. Етапи побудови моделі ?
2. Які моделі називають імітаційними ?
3. Які моделі називають аналітичними ?

4. Як розраховується середня концентрація радіонукліда у грунті?
5. Як розраховується середня концентрація радіонукліда при одноразовому забрудненні ?
6. Як розраховується середня концентрація радіонукліда на границі розподілу середовищ ?
7. Як розраховується середня концентрація радіонукліда при довготривалому забрудненні ?
8. Як розраховується середня концентрація радіонукліда при заданих значеннях початкового забруднення ?
9. Як розраховується відносний вміст радіонукліда у шарі грунту?
10. Як розраховується накопичення радіонукліда в окремих органах рослин?
11. Статистичні моделі для описування міграції радіонуклідів ?
12. Як розраховується радіаційний баланс рослинного покриву ?
13. Як розраховується функція пропускання сонячної радіації ?
14. Як розраховується баланс довгохвильової радіації ?
15. Як розраховується волого переніс у грунті ?
16. Як розраховується транспірація рослинного покриву ?
17. Як розраховується випаровуємість ?
18. Як ураховується рівень ґрунтових вод ?
19. Як розраховується фонд вільного азоту та поглинання азоту ?
20. Як розраховується швидкість поглинання радіонуклідів кореневою системою рослин ?
21. Перенесення радіонуклідів по харчовим ланцюжкам ?
22. Як розраховується добове надходження радіонуклідів з питною водою для населення ?
23. Як розраховується добове надходження радіонуклідів з рибою?
24. Як розраховується утримання радіонуклідів рослиною при поливі ?
25. Як розраховується надходження радіонуклідів через листя ?

Питання для самоперевірки до розділу 3.3

1. Які сновні характеристики грунту обумовлюють поглинання важких металів ?
2. Які морфологічні характеристики рослин обумовлюють швидкість поглинання важких металів ?
3. Як розраховується швидкості поглинання та міграції важких металів у грунті і рослинах ?
4. Як розраховується коефіцієнту токсичності важких металів для рослин ?

Питання для самоперевірки до розділу 3.4

1. Які негативні наслідки використання зрошення ?

2. Що називається осолонцюванням грунту, чим воно обумовлене ?
3. Що називається засоленням грунту, чим воно обумовлене ?
4. Як розраховується функція впливу осолонцювання на екологічну чистоту рослин ?
5. Що називається натрієво – кальцієвим потенціалом ?
6. За якою формулою розраховується функція впливу засолення грунту на екологічну чистоту рослин ?
7. Що називається мінералізацією ?

Питання для самоперевірки до розділу 3.5

1. Що називається біогенними елементами ?
2. Джерела постачання біогенних елементів ?
3. На чому засновується розрахунок виносу біогенних елементів з сільськогосподарських угідь ?
4. Як розраховується питомий виніс біогенів з площі, яку займає сільськогосподарська культура ?
5. За якою формулою розраховується загальний виніс біогенів з водоохоронної зони ?
6. Як розраховується початкова кількість внесених у грунт біогенів, від чого вона залежить ?
7. За яких умов спостерігається втрата біогенів сільськогосподарсь-кими угіддями ?
8. Як розраховується доля втрат біогенних елементів та загальний виніс, внаслідок порушення технології внесення добрив ?

ЛІТЕРАТУРА

1. Берлянд М.Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы - Л.: Гидрометеоиздат.1985
2. Владимиров А.М, Ляхин Ю.И. и др. Охрана окружающей среды - Л.: Гидрометеоиздат.1991 – 424 с.
3. Климатические характеристики условий распространения примесей в атмосфере. Справочное пособие /Под ред. Э.Ю.Безуглой, М.Е. Берлянда.-Л.: Гидрометеоиздат,1983
4. Методические указания по прогнозированию загрязнения воздуха в городах /Под ред.М.Е.Берлянда.- Л.: Гидрометеоиздат,1979
5. Методические указания по прогнозированию загрязнения воздуха в городах с учетом метеорологических условий. РД 52.04.78-85 М.,1986
6. Методические указания: Регулирование выбросов при неблагоприятных метеорологических условиях. РД 52.04.52-85. - Л.: Гидрометеоиздат, 1987.
7. Семенченко Б.А., Белов П.Н. Метеорологические аспекты охраны природной среды. - М.: Изд-во МГУ,1985.
8. Сонькин Л.Р. Синоптико-статистический анализ и краткосрочный прогноз загрязнения атмосферы – Л.: Гидрометеоиздат, 1991.
9. Boettger C.M., Smith H.J. The Nashvill daily air pollution forecast// Mon. Wea. Rev.- 1961. – V.89, N 11. – P. 477 - 481.
10. Уильямс Дж. Основы контроля морских загрязнений. – Л.: Судостроение, 1984. - 135 с.
11. Методические основы оценки и регламентирования антропогенного влияния на качество поверхностных вод / Под ред. проф. Караушева А.В./ - Л.: ГИМИЗ, 1987.
12. Караушев А.В. Речная гидравлика. – Л.: ГИМИЗ, 1969. - 461 с.
13. Соболь И.М. Метод Монте-Карло. – М.: Наука, 1985. - 78 с.
14. Лаппо Д.Д., Стрекалов С.С., Завьялов В.К. Нагрузки и воздействия ветровых волн на гидротехнические сооружения / Теория. Инженерные методы. Расчеты / Под ред. Лаппо Д.Д. / – Л.: ВНИИГ им. Б.Е. Веденеева,1990. – 432 с.
15. Кирюшин В.И. Экологические основы земледелия. – М.: Колос, 1996.
16. Оценка и регулирование качества окружающей природной среды /В.И.Седлецкий, А.Д.Хованский, Н.С.Серпокрылов и др.; Под ред. Н.Д.Порядина, А.Д.Хованского. – М.: Прибой, 1996.
17. Буфатин О.И Паращуков Н.Б., Фомкина Н.Д., Алексахин Р.М. Распределение некоторых радионуклидов в системе почва-оросительная вода (модельный опыт) – Почвоведение, 1983, № 8, с. 133-136.
18. Маликов В.Г., Перепелятников Г.П., Алексахин Р.Т. О связи гидрохимических классов природной оросительной воды с

накоплением ^{89}Sr в урожае озимой пшеницы при орошении дождеванием. – Докл. ВАСХНИЛ, 1981, № 7, с. 25-26.
19. Бихеле З.Н., Молдау Х.А., Росс Ю.К. Математическое моделирование транспирации и фотосинтеза растений при недостатке почвенной влаги. – Л.: Гидрометеоиздат, 1980. – 223 с.
20. Харченко С.И. Гидрология орошаемых земель. – Л.: Гидрометеоиздат, 1980. – 223 с.
21. Най П.Х., Тинкер П.Б. Движение растворов в системе "почва – растение". М.: Колос, 1980. – 365 с.
22. Сельскохозяйственная радиоэкология. /Под ред. Р.М. Алексахина и Н.А. Корнеева. – М.: Экология, 1991. – 297 с.
23. Федоров В.Д., Гильманов Т.Г. Экология. – М.: Изд-во МГУ, 1980. – 464 с.
24. Одум Ю. Основы экологии. – М.: Мир, 1974. – 740 с.
25. Прохоров В.М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. Физико-химические механизмы и моделирование. /Под ред. Р.М. Алексахина. – М.: Энергоиздат, 1981. – 98 с.
26. Полевой А. Н. Моделирование процесса формирования продуктивности зерновых культур в условиях радиоактивного загрязнения агроэкосистем. //Метеорология и гидрология. – 1993, № 3. С. 97–105.
27. Прохоров В. М. Математическая модель поглощения элементов растениями из почвы. //Агрохимия. – 1970, № 7. С. 126–135.
28. Ecophysiology of Short Rotation Forest Crops. //Edited by Mitchell C. P.ft oll. – London, Elsevier Applied Science, 1992. –63 p.
29. Радиоэкология водных объектов зоны влияния аварии на Чернобыльской АЭС. /Под ред. О.В. Войцеховича. - Киев: ВІПОЛ, 1988. -Т.2.- 277с.
30. Muller H.,Prohl G. ECOSYS - 87. A dynamik model for the assessment of the radiological consequences of nuclear accidents // Health Phys. - 1993. - 1993.-V.64. - P. 232-252.

УМОВНІ СКОРОЧЕННЯ

ВРЗП - високий рівень забруднення повітря
ГГО - Головна геофізична обсерваторія, м. Санкт-Петербург
ДАЇ – Державна автоінспекція
ЗА - забруднення атмосфери
ЗП – забруднення повітря
ЗР – забруднювальна речовина
ММ - математичне моделювання
МП – метеорологічні параметри
МПГР - метод послідовної графічної регресії
МРО - метод розпізнавання образів
МУ – метеорологічні умови
НС - навколишнє середовище
НМУ - несприятливі метеорологічні умови
ОВНС – оцінка впливу на навколишнє середовище
ОНС - охорона навколишнього середовища
Пн – північ
ПнС – північно-схід
С – схід
ПдС – південно-схід
Пд - південь
ПдЗ – південно-захід
З - захід
ПнЗ – північно-захід
ППШ - планетарний прикордонний шар
РЗА - рівня забруднення атмосфери
РЗП – рівня забруднення повітря
СЕС – санітарно-епідеміологічна станція
ФАР – фотосінтетична активна радіація
ШР - шкідлива речовина
Zn - циклон
Az_n – антициклон
ЕОМ – електронно обчислювальна машина
ГМС – гідрометеорологічна служба

Навчальне видання

Полетаєва Лариса Миколаївна
Юрасов Сергій Миколайович
Ільїна Валентина Григорівна

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ СТАНУ ДОВКІЛЛЯ

Конспект лекцій

Е К О Н О М І К А
Приватне багатопрофільне підприємство
45-45-80
Свідоцтво ДП № 68-р
Від 07.08.2001 р.
Riso–друк
папір офсетний

Підп. до друку 25.07.2005. Формат 60?84/16. Папір офсетний.
Умовн. друк. арк. 12,0. Тираж 100. Зам. №

Надруковано з готового оригінал-макета

Одеський державний екологічний університет
65016, Одеса, вул.Львівська, 15