

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ЮРАСОВ С. М.

МОДЕЛЮВАННЯ ЕКОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Конспект лекцій

Одеса  
Одеський державний екологічний університет  
2020

УДК 504  
ББК 28.081  
Ю-64

Рекомендовано методичною радою Одеського державного екологічного університету Міністерства освіти і науки України як конспект лекцій (протокол №5 від 27.02.2014 р.)

**Юрасов С. М.**

Моделювання екологічних процесів : конспект лекцій. Одеса: ОДЕКУ, 2014. 45 с.

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

**ISBN 978-966-186-049-9**

© Юрасов С.М., 2014

© Одеський державний екологічний університет, 2020

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП</b> .....	5
<b>1 ЗАГАЛЬНІ УЯВЛЕННЯ ПРО МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ</b> .....	6
1.1 Точність експериментів.....	6
1.1.1 Наближені числа.....	6
1.1.2 Абсолютна та відносна похибки, гранична похибка.....	6
1.1.3 Правила оцінки похибок при обчисленні.....	7
1.2. Елементарні функції та їх застосування при моделюванні.....	8
1.2.1 Підбір емпіричних формул.....	8
1.2.2 Підбір параметрів рівняння регресії.....	11
1.2.3 Режимні функції висоти хвиль.....	14
<b>2 МОДЕЛЮВАННЯ ЗАБРУДНЕННЯ ПОВЕРХНЕВИХ ВОД, АТМОСФЕРНОГО ПОВІТРЯ, ҐРУНТОВОГО ТА РОСЛИННОГО ПОКРИВУ</b> .....	18
2.1 Процеси розповсюдження речовини у середовищі.....	18
2.2 Врахування трансформації (неконсервативності) речовини при моделюванні.....	19
2.3 Моделювання розповсюдження речовини у турбулентному потоці (стала дифузія речовини).....	19
2.4 Моделювання розповсюдження забруднювальних речовин при аварійних розливах (нестала дифузія).....	28
2.5 Метод Монте-Карло.....	34
2.5.1 Сутність методу, випадкові числа з рівномірним розподілом.....	34
2.5.2 Одержання випадкових чисел.....	35
2.5.3 Перетворення випадкових величин.....	37
2.5.4 Приклад використання методу Монте-Карло: розрахунок системи масового обслуговування.....	38
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ</b> .....	44

## ВСТУП

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 й 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 обраного 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.

# 1 ЗАГАЛЬНІ УЯВЛЕННЯ ПРО МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

## 1.1 Точність експериментів

### 1.1.1 Наближені числа

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

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:  $5427 \cdot 10^{-1}$ ;  $5,427 \cdot 10^2$ ;  $0,5427 \cdot 10^3$ . 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  $\lambda$  можна відобразити у вигляді:

$$N = \pm 0, a_1 a_2 a_3 \dots a_k \cdot 10^n$$

чи

$$N = \pm 0, a_1 a_2 a_3 \dots a_k \cdot \lambda^n. \quad (1.1)$$

Підмножина цих чисел не є нескінченною, вона визначається розрядністю  $k$  і межами порядку  $n_1, n_2$  ( $n_1 \leq n \leq n_2$ ). Межі  $n_1$  і  $n_2$  визначають обмеженість дійсних чисел, а розрядність  $k$  - дискретність їх розподілу 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). Різниця між двома сусідніми значеннями дорівнює одиниці останнього розряду. Менші за цю різницю числа ЕОМ бере як нулі.

При округленні вручну десяткове чотирирозрядне число  $0,2562$  можна визначити 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.

### 1.1.2 Абсолютна та відносна похибки, гранична похибка

Розрізняють два види похибок – абсолютну і відносну.

Абсолютна похибка - це різниця поміж справжнім значенням числа ( $X$ ) та його наближенням ( $A$ )

$$\Delta x = X - A. \quad (1.2)$$

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

$$\delta x = \Delta x / A. \quad (1.3)$$

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

Значення  $\Delta a$  приймаються як абсолютна похибка наближеного значення числа  $A$ . У цьому випадку справжнє значення  $X$  знаходиться в інтервалі  $(A - \Delta a; A + \Delta a)$ .

Для наближеного числа, одержаного у випадку округлення, абсолютна похибка дорівнює половині одиниці останнього розряду числа. Наприклад, значення  $a = 0,728$  можна визначити у результаті округлення  $0,72752$  або  $0,72845$ . При цьому  $|\Delta x| \leq 0,0005$ . Таким чином  $\Delta a = 0,0005$ .

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

Гранична абсолютна похибка у цьому випадку в два рази більша і складає  $\Delta a = 0,001$ .

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

$$\delta a = \Delta a / |A|. \quad (1.4)$$

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 зміні форми запису числа кількість значущих цифр не повинна змінюватися, тобто необхідно дотримуватись рівносильності перетворень. Наприклад:  $7500 = 0,7500 \cdot 10^4$  і  $0,110 \cdot 10^2 = 11,0$  - записи рівносильні; а записи  $7500 = 0,75 \cdot 10^4$  і  $0,110 \cdot 10^2 = 11$  - нерівносильні.

### 1.1.3 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

$$\Delta(a \pm v) = \Delta a + \Delta v; \quad (1.5)$$

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

$$\begin{aligned} \delta(a * v) &= \delta a + \delta v, \\ \delta(a / v) &= \delta a + \delta v; \end{aligned} \quad (1.6)$$

при піднесенні числа до степеня гранична відносна похибка збільшується на показник степеня

$$\delta(a^k) = k * \delta a . \quad (1.7)$$

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.

## 1.2. Елементарні функції та їх застосування при моделюванні

### 1.2.1 Підбір емпіричних формул

#### *Помилки результатів вимірів*

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

Систематичні помилки звичайно дають відхилення в одну сторону (як правило вони з тим самим знаком). За величиною вони можуть бути постійними або змінними. Систематичні помилки можуть спричинятись умовами експерименту, дефектом вимірювальної апаратури, її поганим регулюванням і т.п. Ці помилки усувають шляхом налагодження апаратур, введенням відповідних виправлень.

Випадкові помилки є наслідком великої кількості факторів, які не можна усунути або врахувати в належній мірі при вимірюваннях або при обробці результатів цих вимірів. Ці помилки носять випадковий характер, відхиляються в той чи іншій 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 прийняттого значення.

Грубі помилки явно викривлюють результати вимірів, звичайно вони зникають 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 вигляду формули й визначення найкращого значення вхідних до неї параметрів.

Часто вигляд залежності відомий з фізичних міркувань. У такому випадку приступають відразу до визначення її параметрів. Якщо ж характер залежності невідомий, то вигляд формули може бути довільним. Перевага віддається зазвичай простим формулам. Вони вибираються спочатку з геометричних міркувань: експериментальні точки наносяться на графік і приблизно визначається загальний вигляд залежності шляхом порівняння отриманої кривої із графіками відомих функцій (лінійної, степеневі, 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 далі (с. 11-14).

У деяких випадках до лінійної залежності можна звести й інші експериментальні дані, графік яких у декартовій системі координат не є прямою лінією. Цього можна досягти введенням нових змінних  $\xi$  і  $\eta$  замість  $X$  и  $Y$ :  $\xi = \varphi(X, Y)$ ;  $\eta = \psi(X, Y)$ .

Функції  $\varphi(X, Y)$  і  $\psi(X, Y)$  підбираються такими, щоб точки  $(\xi_i, \eta_i)$  лежали на деякій прямій лінії в площині  $(\xi, \eta)$ . Таке перетворення називається вирівнюванням даних.

Для одержання лінійної залежності  $\eta = c\xi + d$  вихідну формулу повинно записати у вигляді:  $\psi(X, Y) = c \varphi(X, Y) + d$ .

Наведемо приклади вирівнювання деяких функцій:

а) степеневі –

$$Y = aX^b \rightarrow \ln Y = \ln a + b \ln X \rightarrow \{\eta = \ln Y; \xi = \ln X\}; \quad (1.8)$$

б) експонентної –

$$Y = a \exp(bX) \rightarrow \ln Y = \ln a + bX \rightarrow \{\eta = \ln Y; \xi = X\}; \quad (1.9)$$

в) гіперболічної –

$$Y = (a + bX)^{-1} \rightarrow 1/Y = a + bX \rightarrow \{\eta = 1/Y; \xi = X\}; \quad (1.10)$$



г) розподілення Вейбула –

$$Y = \exp(-aX^b) \rightarrow \ln(1/Y) = aX^b \rightarrow \ln \ln(1/Y) = \ln a + b \ln X \rightarrow (1.11) \\ \rightarrow \{\eta = \ln \ln(1/Y); \zeta = \ln X\}.$$

Іншою використовуваною емпіричною формулою є багаточлен  $k$ -го порядку:  $Y = a_0 + a_1X + a_2X^2 + \dots + a_mX^m$ . Найчастіше використовується багаточлен другого порядку, рідше - третього.

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

#### *Параметри емпіричної залежності*

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

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  $\varepsilon_i$ , тоді  $\varepsilon_i = \varphi(X_i, a_0, a_1, \dots, a_m) - Y_i, i = 1, 2, \dots, n$ .

Задача знаходження найкращих значень параметрів  $a_0, a_1, \dots, a_m$  зводиться до деякої мінімізації відхилень  $\varepsilon_i$ . Існує кілька способів розв'язання цієї задачі. Розглянемо три з них.

#### Метод обраних точок

За вихідними даними будується система точок на площині  $XOY$  й проводиться плавна лінія, яка найбільш близько примикає до заданих точок. На цій лінії вибираються точки, число яких має дорівнювати числу шуканих параметрів  $(m+1)$ . Координати цих точок  $(X_j^0, Y_j^0)$  ретельно вимірюються й використовуються для запису умови проходження графіка емпіричної функції через обрані точки

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

За цією системою рівнянь оцінюють значення параметрів емпіричної функції.

#### Метод середніх

Сутність методу полягає у тому, що параметри шуканої залежності визначаються за умови рівності нулю суми відхилень  $\varepsilon_i$

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

Це рівняння використовується для пошуку параметрів  $a_j$ . З єдиного рівняння неможливо однозначно знайти  $(m+1)$  параметрів, тому  $\varepsilon_i$

розбивається довільно на систему з  $(m+1)$  рівняннями:

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

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

Метод найменших квадратів

Основа методу полягає у тому, що пошук параметрів  $a_j$  ( $j=0, 1, \dots, m$ ) виконується за умови мінімуму суми квадратів відхилень  $\varepsilon_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ )

$$S = \sum_1^n \varepsilon_i = \sum_1^n (\varphi(X_i, a_0, a_1, \dots, a_m) - Y_i)^2 = \min.$$

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:

$$\begin{aligned} \partial S / \partial a_0 &= 0, \\ \partial S / \partial a_1 &= 0, \\ &\dots\dots\dots \\ \partial S / \partial a_m &= 0. \end{aligned}$$

Параметри  $a_j$  визначають з одержаної системи рівнянь.

1.2.2 Підбір параметрів рівняння регресії

Рівняння прямої має вигляд:

$$Y = aX + b, \quad \text{або} \quad X = a_x Y + b_x, \quad (1.12)$$

де  $a$  - кутовий коефіцієнт, який чисельно дорівнює тангенсу кута нахилу прямої до осі  $OX$ ;

$a_x$  - аналогічно  $a$ , але до осі  $OY$ ;

$b$  і  $b_x$  – значення  $Y$  при  $X = 0$  і  $X$  при  $Y = 0$ .

Якщо  $b$  чи  $b_x$  дорівнює 0, рівняння набуває вигляду:

$$Y = aX, \quad \text{чи} \quad X = a_x Y. \quad (1.13)$$

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  $X_i Y_i$ . Необхідно визначити рівняння регресії й оцінити його точність.

Необхідну умову методу можна записати таким чином

$$S = \Sigma(Y_i - Y_p)^2 = \Sigma[Y_i - (aX_i + b)]^2 = \min. \quad (1.14)$$

Сума (1.14) при тому ж наборі  $X_i Y_i$  є функцією двох змінних  $a$  і  $b$ . Знайдемо параметри  $a$  і  $b$  за умови, що сума (1.14) мінімальна. Для цього необхідно взяти перші похідні від згаданих змінних і прирівняти їх до 0:

$$\begin{aligned} S_a' &= \{\Sigma[Y_i - aX_i - b]^2\}' = 2\Sigma[(Y_i - aX_i - b)(-X_i)] = 0; \\ S_b' &= \{\Sigma[Y_i - aX_i - b]^2\}' = 2\Sigma[(Y_i - aX_i - b)(-1)] = 0. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Розкриваючи дужки, одержуємо:

$$\begin{aligned} \Sigma X_i Y_i &= a \Sigma X_i^2 + b \Sigma X_i; \\ \Sigma Y_i &= a \Sigma X_i + nb. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Віднімемо тепер від  $X_i$  і  $Y_i$  їхні середні значення  $X_{СЕР}$  і  $Y_{СЕР}$ , тобто центруємо ці змінні (графічно такий прийом означає перенесення початку системи координат у точку  $X_{СЕР} Y_{СЕР}$ ):

$$\begin{aligned} \Sigma(X_i - X_{СЕР})(Y_i - Y_{СЕР}) &= a \Sigma(X_i - X_{СЕР})^2 + b \Sigma(X_i - X_{СЕР}); \\ \Sigma(Y_i - Y_{СЕР}) &= a \Sigma(X_i - X_{СЕР}) + nb. \end{aligned}$$

З огляду на те, що  $\Sigma(X_i - X_{СЕР}) = \Sigma(Y_i - Y_{СЕР}) = 0$ , одержимо:

$$\begin{aligned} \Sigma(X_i - X_{СЕР})(Y_i - Y_{СЕР}) &= a \Sigma(X_i - X_{СЕР})^2; \\ nb &= 0. \end{aligned}$$

З цього кутовий коефіцієнт

$$a = \frac{\Sigma(X_i - X_{СЕР})(Y_i - Y_{СЕР})}{\Sigma(X_i - X_{СЕР})^2}. \quad (1.17)$$

Рівняння регресії буде мати вигляд

$$(Y - Y_{СЕР}) = \frac{\Sigma(X_i - X_{СЕР})(Y_i - Y_{СЕР})}{\Sigma(X_i - X_{СЕР})^2} (X - X_{СЕР}). \quad (1.18)$$

Аналогічно кутовий коефіцієнт  $a_x$  буде дорівнювати

$$a_x = \frac{\Sigma(X_i - X_{CEP})(Y_i - Y_{CEP})}{\Sigma(Y_i - Y_{CEP})^2}. \quad (1.19)$$

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

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

$$r_{xy} = \sqrt{a a_x} = \frac{\Sigma(X_i - X_{CEP})(Y_i - Y_{CEP})}{\sqrt{\Sigma(X_i - X_{CEP})^2 \Sigma(Y_i - Y_{CEP})^2}}, \quad (1.20)$$

або

$$r_{xy} = \sqrt{a a_x} = \frac{\Sigma(X_i - X_{CEP})(Y_i - Y_{CEP})}{(n-1)\sigma_x \sigma_y},$$

де  $\sigma_x = \sqrt{\Sigma(X_i - X_{CEP})^2/(n-1)}$  і  $\sigma_y = \sqrt{\Sigma(Y_i - Y_{CEP})^2/(n-1)}$ .

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

$$(Y - Y_{CEP}) = \frac{\sigma_y}{\sigma_x} r_{xy} (X - X_{CEP}). \quad (1.21)$$

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

$$S_y = [\Sigma(Y_i - Y_{pi})^2/n]^{0.5}. \quad (1.22)$$

Розрахунок параметрів рівняння регресії (1.21) простий (табл.1.1): по рядах спостережень  $X_i$  і  $Y_i$  визначаються середні значення  $X_{CEP}$  і  $Y_{CEP}$ ; далі формуються нові ряди  $(X_i - X_{CEP})$ ;  $(Y_i - Y_{CEP})$ ;  $(X_i - X_{CEP})^2$ ;  $(Y_i - Y_{CEP})^2$  і  $(X_i - X_{CEP})(Y_i - Y_{CEP})$ . По цих рядах визначаються  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  та  $r_{xy}$ ; оцінюється точність отриманої залежності  $S_y$ .

Таблиця 1.1 - Розрахунок параметрів рівняння регресії

$n$	$X_i$	$Y_i$	$\Delta X_i = X_i - X_{СЕР}$	$\Delta Y_i = Y_i - Y_{СЕР}$	$\Delta X_i^2$	$\Delta Y_i^2$	$\Delta X_i * \Delta Y_i$	$(\Delta X_i + \Delta Y_i)^2$
1	2	3	4	5	6	7	8	9

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

### 1.2.3 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: за заданою частотою 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, за якою перераховується необхідна частота в забезпеченість.

Крім режимної забезпеченості висоти хвиль існує поняття їхньої системної забезпеченості. Будь-який 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 використовуватись, як характерна для шторму. На практиці найчастіше розглядають середнє значення висоти хвиль, а також 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  $F_P$  за формулою

$$F_P = 100 \Delta t_{um} / (T_B n P_H), \quad (1.23)$$

де  $\Delta t_{um}$  – середня тривалість шторму, д (за відсутності спостережень для морів дорівнює 0,5 д, для океанів - 0,75 д);

$T_B$  – середня тривалість безльодового періоду, д;

$P_H$  – імовірність розглянутого напрямку (у частках від одиниці);

- по режимній функції знаходять значення висоти хвиль  $h_P$  з відповідною частотою в режимі  $F_P$ ;

- по  $h_P$  і відповідному перехідному коефіцієнту  $k_C$  (табл. 1.2) знаходять  $h_P^{(C)}$  значення висоти хвиль із забезпеченістю  $F_C$  у системі.

Режимні функції висоти хвиль можна побудувати 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 виконати графічно і аналітично. Зупинимося на аналітичному методі. Вигляд закону розподілу висоти хвиль в часі відомий – це закон розподілу Вейбула

$$F_P = \exp(-ah^\beta), \quad (1.24)$$

де  $\alpha$  і  $\beta$  – 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):

$$\begin{aligned} F_P = \exp(-ah^\beta) &\rightarrow 1/F_P = \exp(ah^\beta) \rightarrow \ln(1/F_P) = ah^\beta \rightarrow \\ &\rightarrow \ln \ln(1/F_P) = \ln \alpha + \beta \ln h \rightarrow \{Y = \ln \ln(1/F_P); X = \ln h\} \rightarrow \\ &\rightarrow Y = \alpha^* + \beta X. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Методом найменших квадратів можна знайти параметри отриманого

рівняння регресії, вони будуть рівні:

$$\beta = r_{XY} \sigma_Y / \sigma_X, \quad (1.26)$$

$$\alpha^* = Y_{CEP} - \beta X_{CEP}, \quad (1.27)$$

де  $r_{XY}$  – коефіцієнт кореляції ряду  $X$  и ряду  $Y$ ;  
 $\sigma_Y$  – середньоквадратичне відхилення ряду  $Y$ ;  
 $\sigma_X$  – середньоквадратичне відхилення ряду  $X$ ;  
 $Y_{CEP}$  – середнє значення ряду  $Y$ ;  
 $X_{CEP}$  – середнє значення ряду  $X$ .

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

$$X_{CEP} = (\sum X_i) / n; \quad Y_{CEP} = (\sum Y_i) / n; \quad (1.28)$$

$$\sigma_X = [(\sum (X_i - X_{CEP})^2) / (n-1)]^{0.5}; \quad \sigma_Y = [(\sum (Y_i - Y_{CEP})^2) / (n-1)]^{0.5}; \quad (1.29)$$

$$r_{XY} = [\sum (Y_i - Y_{CEP})(X_i - X_{CEP})] / [(n-1) \sigma_Y \sigma_X]. \quad (1.30)$$

Послідовність розрахунку така:

- члени ряду спостережень за хвилюванням  $h_i^{(3)}$  ранжуються в спадному порядку і нумеруються;
- за номером члена ряду розраховується режимна забезпеченість за формулою:

$$F_{Pi} = i / (n+1), \quad (1.31)$$

де  $i$  – номер члена ранжированого ряду;  
 $n$  – кількість членів ряду;  
 - по ряду  $F_{Pi}$  розраховується ряд  $Y_i = \ln \ln(1/F_{Pi})$ , а по ряду  $h_i^{(3)}$  розраховується ряд  $X_i = \ln h_i$ ;  
 - для рядів  $Y$  і  $X$  розраховуються середні значення, середньоквадратичні відхилення і коефіцієнт кореляції;  
 - за цими характеристиками визначаються параметри  $\alpha^*$  и  $\beta$ ;  
 - розраховується параметр  $\alpha = \exp(\alpha^*)$ ;  
 - для кожного члена ряду  $F_{Pi}$  розраховується відповідне йому  $h^{(3)}_{Pi}$  за формулою

$$h^{(3)}_{Pi} = [(1/\alpha) \ln(1/F_{Pi})]^{1/\beta}; \quad (1.32)$$

- перевіряється точність апроксимації:

$$S = [(\sum (h^{(3)}_i - h^{(3)}_{Pi})^2) / n]^{0.5}, \quad (1.33)$$

$$S_H = S/h^{(3)}_{CEP},$$

де  $h^{(3)}_{CEP}$  – середнє значення ряду спостережень за хвилюванням;  
 - за формулою (1.23) розраховується  $F_P$  и за формулою (1.32) 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. 1.2)

Таблиця 1.2 – Перехідні коефіцієнти  $k_C$  (для  $H / \lambda \geq 0,5$ , де  $H$  - середня глибина акваторії;  $\lambda$  - 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



## 2 МОДЕЛЮВАННЯ ЗАБРУДНЕННЯ ПОВЕРХНЕВИХ ВОД, АТМОСФЕРНОГО ПОВІТРЯ, ҐРУНТОВОГО ТА РОСЛИННОГО ПОКРИВУ

### 2.1 Процеси розповсюдження речовини у 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.

#### *Адвекція*

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

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

$$q_A = V_C C. \quad (2.1)$$

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

$$q_{AX} = V_X C; \quad q_{AY} = V_Y C \quad \text{і} \quad q_{AZ} = V_Z C. \quad (2.2)$$

#### *Осідання завислої речовини*

Одинична витрата (інтенсивність переносу) речовини дорівнює

$$q_o = u C, \quad (2.3)$$

де  $u$  – швидкість осідання частинок (гідравлічна крупність).

#### *Турбулентна дифузія*

Турбулентна дифузія речовини відбувається за рахунок вихрового руху потоку.

Одинична турбулентна витрата речовини у напрямку осей довільної системи координат буде дорівнювати:

$$q_{TX} = -D \partial C / \partial x, \quad q_{TY} = -D \partial C / \partial y, \quad q_{TZ} = -D \partial C / \partial z, \quad (2.4)$$

де  $D$  - коефіцієнт турбулентної дифузії.

## 2.2 Врахування трансформації (неконсервативності) речовини при моделюванні

Неконсервативність речовини при моделюванні враховується за допомогою коефіцієнта неконсервативності  $k_H$ , розмірність якого 1/с. При зниженні концентрації речовини коефіцієнт  $k_H$  має негативне значення. Ця величина характеризує швидкість зміни концентрації речовини в частках від початкової концентрації

$$k_H = \Delta C / (C \Delta t). \quad (2.5)$$

За малий період часу зниження концентрації речовини дорівнює

$$\Delta C = k_H C \Delta t. \quad (2.6)$$

Іноколи замість  $k_H$  використовують коефіцієнт розпаду  $k$ , розмірність цього коефіцієнта – 1/д. При зниженні концентрації речовини він має позитивне значення. Коефіцієнт  $k$  більший за  $k_H$  у стільки разів, скільки секунд в добі

$$k = - 86400 k_H. \quad (2.7)$$

Закон зміни концентрації речовини у часі має вигляд

$$C(t) = C(0) \exp(k_H t) = C(0) \exp(-kt), \quad (2.8)$$

де  $C(0)$  – початкова концентрація речовини.

## 2.3 Моделювання розповсюдження речовини у турбулентному потоці

У турбулентних потоках явище пульсації швидкостей супроводить перемішування водних (повітряних) мас. Домішки, що потрапили у ту або іншу частину потоку, під впливом турбулентного перемішування розповсюджуються в суміжні струмені. Це приводить 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 зменшення 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. 2.1) об'ємом  $dW = dxdydz$ . Сторони цього паралелепіпеда рівнобіжні осям координат, що проходять таким чином: площина  $XOZ$  рівнобіжна вільній поверхні потоку, а вісь  $OY$  спрямована вертикально вниз. Грані паралелепіпеда, перпендикулярні до осі  $OX$ , позначимо 1 і 2; перпендикулярні до  $OZ$  – 3 і 4; перпендикулярні до  $OY$  – 5 і 6. Концентрації 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 -  $V_xV_yV_z$ .

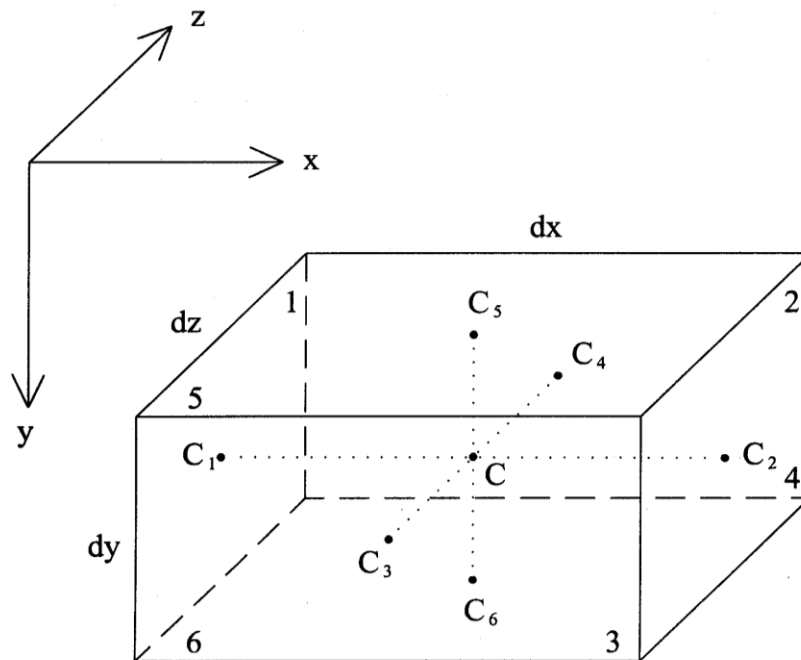


Рис. 2.1 – Схема виводу диференціального рівняння

Розглядуваний контрольний паралелепіпед закріпимо жорстко в просторі й оцінімо, як зміниться концентрація завислої у воді речовини за час  $\delta t$  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

$$m_1 = m_{A1} + m_{T1} = d\omega_1 \delta t q_{A1} + d\omega_1 \delta t q_{T1} = dydz \delta t (V_X C_1 + q_{T1}). \quad (2.9)$$

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

$$m_2 = dydz \delta t (V_X C_2 + q_{T2}). \quad (2.10)$$

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  $\partial C / \partial x$ :

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

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

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

У такий спосіб

$$\Delta m_{12} = dW \delta t [-V_X \frac{\partial C}{\partial x} + D_X \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}], \quad (2.11)$$

де  $dW = dx dy dz$ .

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

$$\Delta m_{34} = dW \delta t [-V_Z \frac{\partial C}{\partial z} + D_Z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}]. \quad (2.12)$$

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

$$\Delta m_{056} = m_{05} - m_{06} = dx dz \delta t (q_{05} - q_{06}) = dx dz \delta t (u C_5 - u C_6) =$$

$$= dx dz \delta t (u C_5 - u C_6) = dx dz \delta t [u(C_5 - C_6)] = dx dz \delta t [u(-\partial C / \partial y) dy],$$

$$\Delta m_{56} = \Delta m_{A56} + \Delta m_{T56} + \Delta m_{O56} = dW \delta t \left[ -V_Y \frac{\partial C}{\partial y} + D_Y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u \frac{\partial C}{\partial y} \right]. \quad (2.13)$$

Сума величин  $\Delta m = \Delta m_{12} + \Delta m_{34} + \Delta m_{56}$  характеризує зміну кількості речовини в паралелепіпеді за час  $\delta t$ . 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

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_Y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_Z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial y} - V_X \frac{\partial C}{\partial x} - V_Y \frac{\partial C}{\partial y} - V_Z \frac{\partial C}{\partial z}. \quad (2.14)$$

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:

$$\frac{dC}{dt} = D_X \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_Y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_Z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial y}. \quad (2.15)$$

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

$$\frac{dC}{dt} = D_{ГОР} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + D_{БЕРТ} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u \frac{\partial C}{\partial y}. \quad (2.16)$$

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

$$\frac{dC}{dt} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) - u \frac{\partial C}{\partial y}. \quad (2.17)$$

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

*Модель розповсюдження речовини у потоці. Вивід розрахункових формул*

У загальному вигляді рівняння турбулентної дифузії консервативної домішки у потоці (при  $D = \text{const}$ ) 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  $Q_{CT}$  та концентрацією домішки  $C_{CT}$ , фонові концентрація домішки  $C_E$ . З лівого берега боковий приплив речовини відсутній, з правого – дорівнює  $q_B$ .

В залежності від характеру потоку і особливостей задачі, яка вирішується, рівняння можна записати 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 ( $V_C C \gg -D \partial C / \partial x$ ).

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

$$\begin{aligned} V_{CEP} (\partial C / \partial x) &= D (\partial^2 C / \partial z^2); \\ q_{П} &= q_B, \quad q_L = 0; \\ C(0, z) &= C_{CT}, \quad \text{при } 0 \leq z < b; \\ C(0, z) &= C_E, \quad \text{при } b \leq z \leq B_C, \end{aligned} \quad (2.18)$$

де  $q_{П}$  і  $q_L$  – 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 витісняють воду потоку.

Уздовж потоку від джерела забруднення зробимо створи [11] із кроком  $\Delta x$ , по ширині розіб'ємо потік на струмені із кроком  $\Delta z$  (рис. 2.2)

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 (2.18) у формі кінцевих різниць

$$V_{СЕР}(\Delta C/\Delta x) = D(\Delta^2 C/\Delta z^2). \quad (2.19)$$

	↑ $\Delta z$ ↓		← $\Delta x$ →	X
$m - 1$		$C_{k,m-1}$		$V_C \rightarrow$
$m$		$C_{k,m}$	$C_{k+1,m}$	
$m + 1$		$C_{k,m+1}$		
Z		$k$	$k + 1$	

Рис. 2.2 – Схема рішення диференціального рівняння

Визначимо перші похідні в рівнянні (2.19), використовуючи визначені позначення (рис. 2.2):

$$\Delta C/\Delta x = (C_{k+1,m} - C_{k,m})/\Delta x, \quad (2.20)$$

$$(\Delta C/\Delta z)_2 = (C_{k,m+1} - C_{k,m})/\Delta z, \quad (\Delta C/\Delta z)_1 = (C_{k,m} - C_{k,m-1})/\Delta z, \quad (2.21)$$

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{(\Delta C/\Delta z)_2 - (\Delta C/\Delta z)_1}{\Delta z} = \frac{(C_{k,m+1} - C_{k,m})/\Delta z - (C_{k,m} - C_{k,m-1})/\Delta z}{\Delta z},$$

звідси

$$\Delta^2 C/\Delta z^2 = \frac{C_{k,m+1} + C_{k,m-1} - 2C_{k,m}}{\Delta z^2}. \quad (2.22)$$

Підставимо (2.20) і (2.22) у (2.19) та перенесемо  $V_C$  і  $\Delta x$  у праву частину рівняння, тоді

$$C_{k+1,m} - C_{k,m} = \frac{D \Delta x}{V_C \Delta z^2} [C_{k,m+1} + C_{k,m-1} - 2C_{k,m}] . \quad (2.23)$$

Розв'язуючи це рівняння відносно  $C_{k+1,m}$ , одержимо

$$C_{k+1,m} = a(C_{k,m+1} + C_{k,m-1}) + (1 - 2a)C_{k,m} , \quad (2.24)$$

де  $a = D\Delta x / (V_C \Delta z^2)$ .

Формулу (2.24) можна спростити, взявши  $a = 0,25$ , тоді

$$C_{k+1,m} = 0,25(C_{k,m+1} + C_{k,m-1}) + 0,5C_{k,m} , \quad (2.25)$$

при  $\Delta x = V_C \Delta z^2 / (4D)$ . (2.26)

б е р е г				
1(N=B <sub>C</sub> /Δz)		$C_{k,1(N)}$	$C_{k+1,1(N)}$	X
2(N-1)		$C_{k,2(N-1)}$		
Z		k	k + 1	

Рис. 2.3 – Нумерація значень концентрацій домішок біля берега

Розв'яжемо рівняння (2.19) для першого струменя за умови відсутності бокового припливу речовини (рис. 2.3):

$$\Delta C / \Delta x = (C_{k+1,1} - C_{k,1}) / \Delta x, \quad (2.27)$$

$$\Delta^2 C / \Delta z^2 = \frac{(\Delta C / \Delta z)_2 - (\Delta C / \Delta z)_1}{\Delta z} = \frac{(C_{k,2} - C_{k,1}) / \Delta z - 0}{\Delta z},$$

звідси

$$\Delta^2 C / \Delta z^2 = (C_{k,2} - C_{k,1}) / \Delta z^2 , \quad (2.28)$$

$$C_{k+1,1} - C_{k,1} = \frac{D \Delta x}{V_C \Delta z^2} [C_{k,2} - C_{k,1}] ,$$



$$C_{k+1,1} = aC_{k,2} + (1 - a)C_{k,1} ,$$

$$C_{k+1,1} = 0,25C_{k,2} + 0,75C_{k,1} . \quad (2.29)$$

При наявності бокового припливу речовини розв'язок для струменя  $N$  буде мати такий вигляд:

$$q_B = H_c q_T = - H_c D \partial C / \partial z \rightarrow \partial C / \partial z = - q_B / (H_c D), \quad (2.30)$$

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{(\Delta C / \Delta z)_2 - (\Delta C / \Delta z)_1}{\Delta z} = \frac{(C_{k,N-1} - C_{k,N}) / \Delta z + q_B / (H_c D)}{\Delta z},$$

звідси

$$\frac{\Delta^2 C}{\Delta z^2} = \frac{C_{k,N-1} - C_{k,N} + \Delta z q_B / (H_c D)}{\Delta z^2} . \quad (2.31)$$

Тоді

$$C_{k+1,N} - C_{k,N} = \frac{D \Delta x}{V_c \Delta z^2} \left[ C_{k,N-1} - C_{k,N} + \frac{\Delta z q_B}{H_c D} \right] ,$$

$$C_{k+1,N} = a [C_{k,N-1} + \Delta z q_B / (H_c D)] + (1 - a) C_{k,N} ,$$

$$C_{k+1,N} = 0,25 [C_{k,N-1} + \Delta z q_B / (H_c D)] + 0,75 C_{k,N} . \quad (2.32)$$

Таким чином, рішення моделі розповсюдження речовини у потоці можна записати у такому вигляді:

$$\begin{aligned} C_{k+1,m} &= 0,25(C_{k,m+1} + C_{k,m-1}) + 0,5C_{k,m} , \\ \text{при } \Delta x &= V_{CEP} \Delta z^2 / (4D), \quad 2 \leq m \leq (B_{CEP} / \Delta z) - 1; \\ C_{k+1,1} &= 0,25C_{k,2} + 0,75C_{k,1}; \\ C_{k+1,N} &= 0,25 [C_{k,N-1} + \Delta z q_B / (H_{CEP} D)] + 0,75C_{k,N}; \\ C(k,m) &= C_{CT}, \quad \text{при } k = 0 \text{ і } 1 \leq m \leq b / \Delta z; \\ C(k,m) &= C_E, \quad \text{при } k = 0 \text{ і } b / \Delta z < m \leq B_{CEP} / \Delta z. \end{aligned} \quad (2.33)$$

*Вихідні дані для розрахунку*

$Q_E$  – 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;

$V_{CER}$  – середня швидкість потоку на розрахунковій ділянці;  
 $B_{CER}$  – середня ширина потоку у місті скиду;  
 $H_{CER}$  – середня глибина потоку на розрахунковій ділянці;  
 $D$  – коефіцієнт турбулентної дифузії.

*Послідовність розрахунку*

1. Визначається умовна площа поперечного перерізу припливу стічних вод, виходячи з припущення, що швидкість стічних вод у потоці дорівнює швидкості самого потоку,

$$\delta = Q_{CT}/V_{CER}. \quad (2.34)$$

2. Розраховується ширина припливу стічних вод у початковому створі (ширина, на якій відбувається витиснення чистої води стічною водою з концентрацією домішки  $C_{CT}$ ):

$$v = \delta/H_{CER}. \quad (2.35)$$

3. За величиною “ $v$ ” визначається ширина розрахункової комірки  $\Delta z$  з урахуванням такої вимоги:

$$\Delta z = v/n; \quad n = 1, 2, \dots; \quad \Delta z \leq 0,1B_{CER}. \quad (2.36)$$

4. Розраховується довжина розрахункової комірки:

$$\Delta x = V_{CER}\Delta z^2/(4D). \quad (2.37)$$

5. Визначається загальна кількість струменів по ширині потоку

$$N = B_{CER}/\Delta z. \quad (2.38)$$

6. Визначається кількість струменів (із загального  $N$ ), у яких знаходиться стічна вода:

$$n = v/\Delta z. \quad (2.39)$$

7. На розрахунковій області потоку розбивається сітка з комірками  $\Delta x$ ,  $\Delta z$ . У початковому створі в  $n$  комірок, що відповідають місцю розташування скиду стічних вод, записується значення концентрації домішки у стічних водах ( $C_{cm}$ ). В решту  $N-n$  комірок початкового створу записуються значення фонові концентрації ( $C_E$ ).

8. Розрахунок концентрації домішки в комірках наступного створу здійснюється за формулою (2.25) (рис. 2.4).

При розрахунках у межах потоку використовуються формули (2.29) чи (2.32).

Розрахувавши таким чином концентрації домішки в комірках другого створу, переходимо до наступного і т.д.

В усіх створах сума концентрацій домішки повинна бути постійною.

9. Якщо розміри комірок дуже малі, [11] то розрахунок виконується до створу, де стічні води поширюються на 20-50 комірок. Після цього комірки об'єднуються по  $\mu = 2, 3, \dots$  (новий крок  $\Delta z_2$  по осі  $OZ$  дорівнює  $\mu\Delta z_1$ ), визначається новий крок  $\Delta x_2 = \mu^2\Delta x_1$  і розрахунок продовжується. При необхідності можна повторити збільшення кроку.

	$k$	$k+1$	
$m+1$	$C_{k,m+1} - 1/4 \rightarrow$	$\downarrow$	
$m$	$C_{k,m} - 1/2 \rightarrow$	$C_{k+1,m}$	
$m-1$	$C_{k,m-1} - 1/4 \rightarrow$	$\uparrow$	
...			
2	$C_{k,2} - 1/4 \rightarrow$	$\downarrow$	
1	$C_{k,1} - 3/4 \rightarrow$	$C_{k+1,1}$	

межа потоку (берег)

Рис. 2.4 – Схема розрахунку концентрацій забруднювальної речовини у наступному створі

2.4 Моделювання розповсюдження забруднювальних речовин при аварійних розливах (нестала дифузія)

*Вивід диференціального рівняння розповсюдження забруднювальних речовин у циліндричних координатах*

Уявімо, 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  $C_0$  відбувається до дна водойми (змінення концентрації речовини по глибині відсутнє).

Об'єм забруднення у товщі води уявімо 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 виконуватись 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  $\alpha$  (рис.2.5). На відстані  $r$  від центра концентрацію нафти та її похідну по радіусу позначимо  $C$  і  $\partial C/\partial r$ , а інтенсивність турбулентного переносу та його похідну –  $q$  та  $\partial q/\partial r$ .

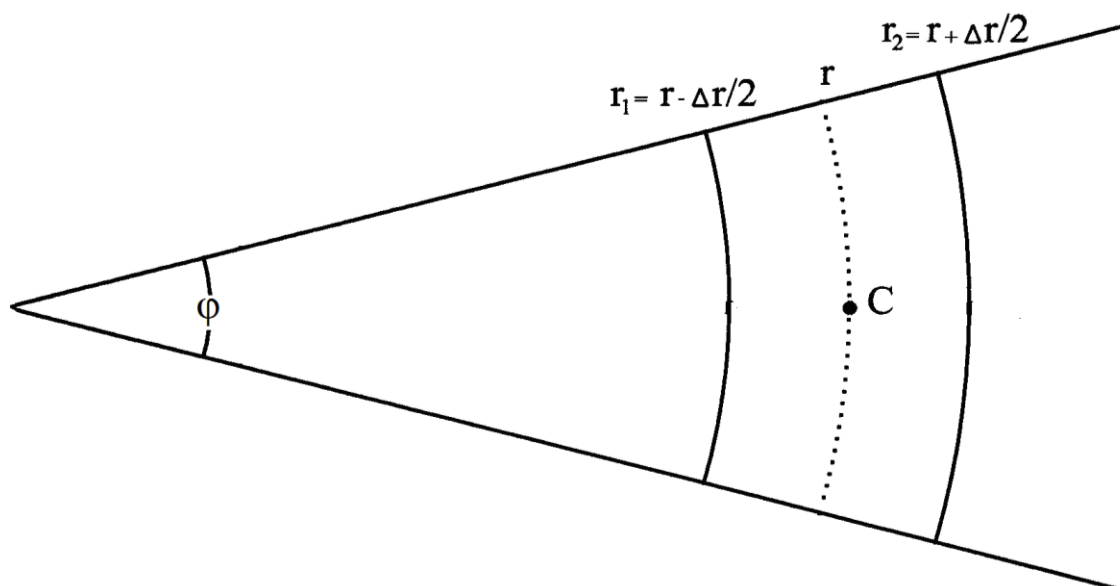


Рис. 2.5 – Схема виводу диференціального рівняння

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  $\alpha r_1$  і  $\alpha r_2$ .

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  $\delta t$ , виражається величиною:

$$m_1 = q_1 \Delta\omega_1 \delta t = q_1 H_C \alpha r_1 \delta t = q_1 H_C \alpha (r - \Delta r/2) \delta t. \quad (2.40)$$

За цей же час через другу поверхню (дугу) буде винесено

$$m_2 = q_2 H c \alpha (r + \Delta r / 2) \delta t. \quad (2.41)$$

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

$$\begin{aligned} \Delta m &= m_1 - m_2 = H c \alpha \delta t [q_1 (r - \Delta r / 2) - q_2 (r + \Delta r / 2)] = \\ &= H c \alpha \delta t [r (q_1 - q_2) - (q_1 + q_2) \Delta r / 2]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Представим різницю і суму величин  $q_1$  і  $q_2$  у такому вигляді:

$$\begin{aligned} q_1 - q_2 &= - (\partial q / \partial r) \Delta r = - \partial / \partial r [-D (\partial C / \partial r)] \Delta r = D (\partial^2 C / \partial r^2) \Delta r, \\ (q_1 + q_2) / 2 &= q = - D (\partial C / \partial r). \end{aligned}$$

Тоді формула (2.65) буде мати вигляд

$$\begin{aligned} \Delta m &= H c \alpha \delta t [r D (\partial^2 C / \partial r^2) \Delta r - (-D (\partial C / \partial r)) \Delta r] = \\ &= H c \alpha r \Delta r \delta t [D (\partial^2 C / \partial r^2) + D (\partial C / \partial r) / r] = \\ &\Delta W \delta t [D (\partial^2 C / \partial r^2) + D (\partial C / \partial r) / r]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Крім того, у контрольному об'ємі за час  $\delta t$  буде трансформовано  $\Delta m_H = C k_H \Delta W \delta t$  речовини (де  $k_H$  - коефіцієнт неконсервативності, 1/с). З врахуванням цього загальне зниження кількості речовини ( $\Delta m_0$ ) в об'ємі буде дорівнювати

$$\Delta m_0 = \Delta m + \Delta m_H = \Delta W \delta t [D (\partial^2 C / \partial r^2) + D / r (\partial C / \partial r) + C k_H]. \quad (2.44)$$

Процеси виносу, надходження й трансформації речовини визначають зміни її кількості за часом в контрольному об'ємі. Ці зміни можна подати у вигляді

$$\Delta m_0 = \Delta W \delta t (\partial C / \partial t). \quad (2.45)$$

Якщо ми праві частини рівнянь (2.67) і (2.68) розділимо на  $\Delta W \delta t$ , то одержимо

$$\partial C / \partial t = D (\partial^2 C / \partial r^2) + D / r (\partial C / \partial r) + C k_H. \quad (2.46)$$

Таким чином, модель розповсюдження речовини при аварійних розливах разом з граничними й початковими умовами буде записана у вигляді:

$$\begin{aligned} \partial C / \partial t &= D(\partial^2 C / \partial r^2) + D/r (\partial C / \partial r) + Ck_H, & (2.47) \\ C(t, r) &= C_0, & \text{при } t = 0 \text{ і } 0 < r \leq r_0; \\ C(t, r) &= C_E, & \text{при } t = 0 \text{ і } r > r_0, \end{aligned}$$

де  $C_0$  - концентрація речовини в початковий момент часу у плямі;  
 $r_0$  - радіус плями в початковий момент часу.

*Розв'язання диференціального рівняння*

Скористуємось диференціальним рівнянням з граничними й початковими умовами (2.47) для виводу розрахункової формули, яка дозволить визначити значення концентрації речовини в плямі в різні моменти часу.

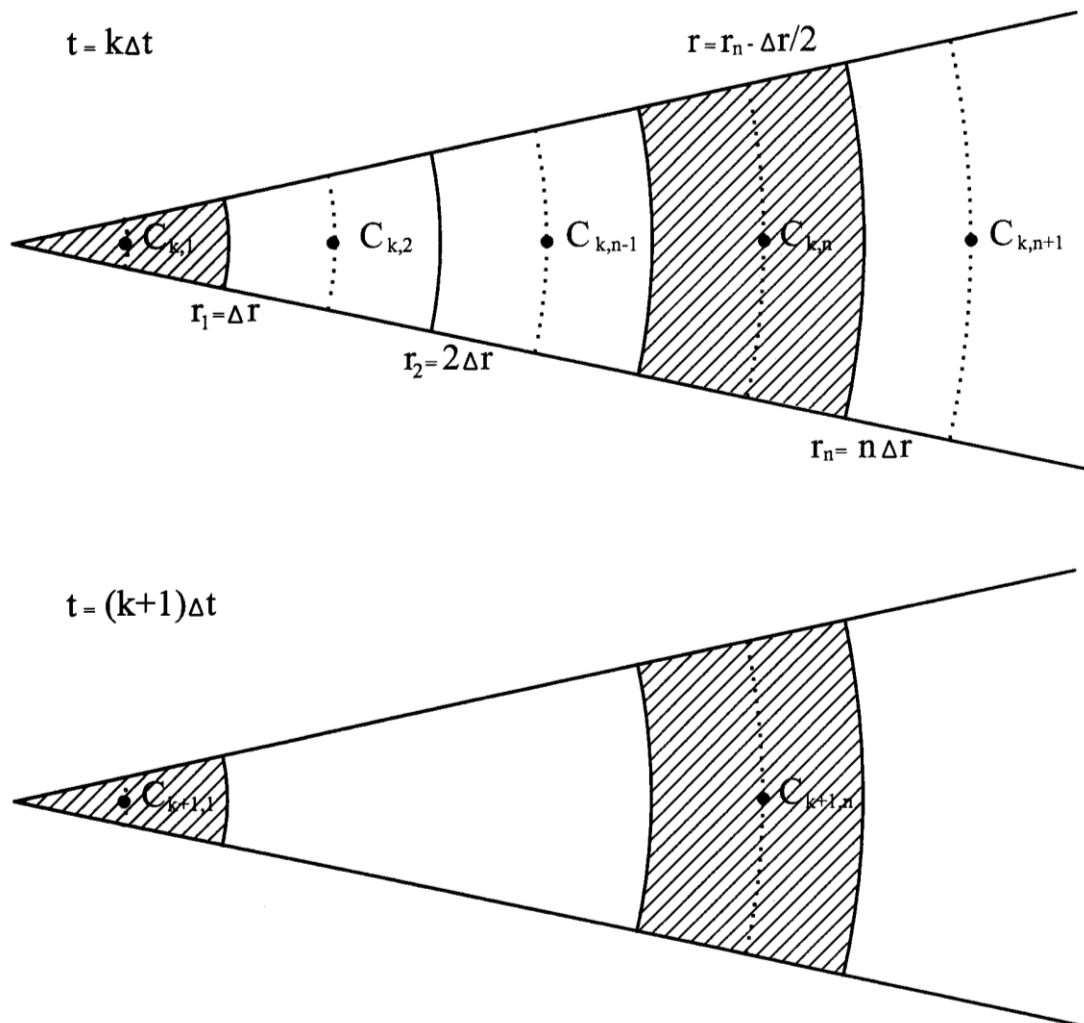


Рис. 2.6 – Схема розв'язання диференціального рівняння

В деякий момент [11] часу  $t=k\Delta t$  (де  $\Delta t$  - крок в часі) виділимо на

плямі речовини сектор з кутом  $\alpha$ , розіб'ємо його дугами з кроком  $\Delta r$  на відсіки (рис. 2.6), пронумеруємо ці відсіки, починаючи від центра  $n=1,2,3\dots$ . 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 (2.47) у формі кінцевих різниць

$$\Delta C/\Delta t = D(\Delta^2 C/\Delta r^2) + (D/r)(\Delta C/\Delta r) + k_H C. \quad (2.48)$$

Запишемо всі прирощення в (2.48), використовуючи прийняті позначення:

$$\Delta C/\Delta t = (C_{k+1,n} - C_{k,n})/\Delta t,$$

$$\Delta C/\Delta r = (C_{k,n+1} - C_{k,n-1})/(2\Delta r),$$

$$\Delta^2 C/\Delta r^2 = [(\Delta C/\Delta r)_П - (\Delta C/\Delta r)_Л]/\Delta r =$$

$$= [(C_{k,n+1} - C_{k,n})/\Delta r - (C_{k,n} - C_{k,n-1})/\Delta r]/\Delta r =$$

$$= (C_{k,n+1} + C_{k,n-1} - 2C_{k,n})/\Delta r^2,$$

$$r = (n\Delta r - \Delta r/2) = \Delta r(n - 1/2) = \Delta r(2n - 1)/2,$$

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 (2.48), розкривши дужки і вирішивши її відносно  $C_{k+1,n}$ , отримаємо

$$C_{k+1,n} = (1 - 2a + k_H \Delta t)C_{k,n} + a(bC_{k,n+1} + dC_{k,n-1}), \quad (2.49)$$

де  $a=D\Delta t/\Delta r^2$ ;  $b=2n/(2n-1)$ ;  $d=2(n-1)/(2n-1)$ .

Формулу (2.49) можна спростити, взявши  $a = 0,25$ , тоді

$$C_{k+1,n} = (0,5 + k_H \Delta t) C_{k,n} + 0,25(b C_{k,n+1} + d C_{k,n-1}), \quad (2.50)$$

за умови  $\Delta t = \Delta r^2 / (4D)$  і  $\Delta t < 0,5 / (-k_H)$ .

При розливі консервативної речовини ( $k_H = 0$ ) формула (2.50) буде мати вигляд

$$C_{k+1,n} = 0,5 C_{k,n} + 0,25(b C_{k,n+1} + d C_{k,n-1}). \quad (2.51)$$

### Порядок розрахунку

Для розрахунку переносу й дифузії забруднювальних речовин при їх аварійних розливах необхідні такі вихідні дані: об'єм розливу  $W_0$ ; характеристика розкладання розливої речовини  $k_H$ ; початкова  $C_0$  і фонові  $C_E$  концентрації 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  $r_0$ , виходячи з припущення, що витиснення чистої води стічною водою з концентрацією домішки  $C_0$  відбувається до дна водойми,

$$r_0 = \sqrt{W_0 / \pi H_C}. \quad (2.52)$$

2. За величиною  $r_0$  визначається ширина кільця  $\Delta r$  з урахуванням такої вимоги:

$$\Delta r = r_0 / n_0; \quad n_0 \geq 3. \quad (2.53)$$

3. Розраховується крок у часі

$$\Delta t = \Delta r^2 / (4D). \quad (2.54)$$

4. В  $n_0$  перших кільцях, починаючи від центра плями, записується початкова концентрація  $C_0$ . За формулою (2.50) розраховується концентрація речовини в наступний момент часу (через  $\Delta t$ ). Розрахунок ведеться покроково від одного моменту часу до другого в межах усього розглядуваного періоду часу.

5. Якщо розміри кільця дуже малі, то розрахунок виконується до моменту часу, коли забруднення поширюється на 20-50 кільця. Після цього кільця об'єднуються по  $\mu=2,3,\dots$  (нова ширина кільця  $\Delta r_2$  дорівнює  $\mu \Delta r_1$ ). Концентрація осереднюється із врахуванням площі кільця

$$C_{2kj} = \frac{\sum_{(j-1)\mu+1}^{j\mu} C_{1ki}(2i-1)}{\sum_{(j-1)\mu+1}^{j\mu} (2i-1)}, \quad \text{при } j = 1, 2, \dots, n_k/\mu,$$

де  $C_{2kj}$  – концентрація в  $j$ -тому кільці, нова ширина якого  $\Delta r_2$  в  $k$ -й момент



часу.

Визначається новий крок у часі  $\Delta t_2 = \mu^2 \Delta t_1$  і розрахунок продовжується. При необхідності збільшення можна повторити.

6. В усі моменти часу повинна виконуватися умова

$$(1 - k_H \Delta t)^k C_0 n_0^2 = \sum_{i=1}^{n_0+k} C_{ki} (2i - 1),$$

де  $n_0+k$  – кількість кілець у плямі забруднення в  $k$ -й момент часу.

## 2.5 Метод Монте-Карло

### 2.5.1 Сутність методу, випадкові числа з рівномірним розподіленням

Метод Монте-Карло можна визначити, як чисельний метод розв'язання 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 називають імітаційним. Тут варто додати, що часто цей метод використовують і для вирішення математичних задач, не пов'язаних з будь-якими випадками, тоді штучно вигадують вірогідну модель, що дозволяє розв'язати цю задачу.

Щоб зрозуміти, про що йде мова, розглянемо приклад. Припустимо, що нам необхідно обчислити площу плоскої фігури  $S$ . Межа фігури довільна і може задаватись графічно чи аналітично. Нехай ця фігура буде усередині одиничного квадрата. Виберемо усередині квадрата  $N$  випадкових точок, позначимо  $N'$  число точок, що попали усередину  $S$ . Геометрично очевидно, що площа  $S$  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. Вправний стрілець всі  $N$  разів може влучити у фігуру  $S$ . 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  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_N$  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  $3\sigma$  відомо, що

$$P \{ Nm + 3\sigma < \sum_1^N \xi_i < Nm - 3\sigma \} \approx 0,997, \quad (2.55)$$

чи 
$$P \{ m + 3b/\sqrt{N} < 1/N \sum_1^N \xi_i < m - 3b/\sqrt{N} \} \approx 0,997,$$

чи 
$$P \{ |(1/N \sum_1^N \xi_i) - m| < 3b/\sqrt{N} \} \approx 0,997. \quad (2.56)$$

В останньому виразі знаходиться і спосіб визначення  $m$ , і оцінка похибки. З останнього виразу видно, що змодельовавши  $N$  випадкових величин і знайшовши їхню суму, ми одержимо оцінку  $m$ , що відрізняється від вірного значення не більше ніж на  $3b/\sqrt{N}$ . 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 десятьма рівними секторами, у кожному 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  $\Delta t$  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 відповідали прийнятій системі тестів. Тому Нейман (один з авторів методу) запропонував розраховувати числа за формулою. Числа, що мають властивості випадкових чисел, але розраховуються за формулою, називають псевдовипадковими.

Найбільшого поширення набув метод відрахувань:

$$m_{k+1} = 5^{17} m_k \pmod{2^{40}}, \quad (2.57)$$

$$\sigma_k = 2^{-40} m_k,$$

де  $m_{k+1}$  – число, що дорівнює залишку від розподілу  $5^{17}$  на  $2^{40}$  (цей залишок називається найменшим позитивним відрахуванням), - звідси і назва методу;

$\sigma_k$  - псевдовипадкове число, рівномірно розподіляється на інтервал  $[0 - 1)$ .

Дані формули легко реалізувати на ЕОМ, які працюють з 40-розрядними числами. Для ЕОМ типу ЕС, де числа мають 31 розряд, запропонована формула

$$m_{k+1} = 5^{13} m_k \pmod{2^{31}}, \quad (2.58)$$

$$\sigma_k = 2^{-31} m_k.$$

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 із заданим законом розподілення. Для тієї мети перетворюють випадкові числа з рівномірним розподіленням у інтервалі  $[0 - 1)$ .

#### Дискретні випадкові величини

Припустимо, нам необхідно одержати значення випадкової величини

$$\xi = \left( \begin{array}{c} X_1, X_2, X_3 \dots X_n \\ P_1, P_2, P_3 \dots P_n \end{array} \right).$$

Для цього [13] інтервал  $[0 - 1)$  розіб'ємо на  $n$  відрізків, довжини яких  $P_1, P_2, P_3, \dots P_n$ . Координати точок розподілення будуть дорівнювати  $P_1; (P_1+P_2); (P_1+P_2+P_3); \dots; (P_1+P_2+P_3+\dots+P_{n-1})$ . Отримані інтервали нумеруємо – 1, 2, 3 ...  $n$ .... На цьому підготовка до розіграшу закінчується.

Розігрується число  $\gamma_i$  (псевдовипадкове), дивимося на який інтервал воно потрапило, тобто визначаємо номер інтервалу. За номером визначаємо значення величини  $\xi$ . Якщо ми проведемо велику кількість розіграшів і оцінимо  $P_i$  для кожного  $X_i$ , то вони будуть дуже наближені до заданих  $P_i$ .

#### Безперервні випадкові величини

#### Метод обернених функцій

Нам необхідно одержати значення  $\xi$ , розподіленого на інтервалі  $(a - b)$  із густиною  $p(x)$ . Значення  $\xi$  можна знаходити [13] з рівняння:

$$\int_a^{\xi} p(X) dX = \gamma,$$

тобто, вибравши значення  $\gamma_i$ , необхідно розв'язати рівняння відносно  $\xi_i$ .

Приклад: експонентне розподілення

$$p(X) = ae^{-aX} \rightarrow \int_0^{\xi} ae^{-aX} dX = \gamma \rightarrow e^{-aX} \Big|_0^{\xi} = \gamma \rightarrow 1 - e^{-a\xi} = \gamma \rightarrow e^{-a\xi} = 1 - \gamma \rightarrow$$

$$a\xi = \ln(1 - \gamma) \rightarrow \xi = (1/a) \ln(1 - \gamma) \rightarrow \xi = - (1/a) \ln \gamma. \quad (2.59)$$

Моделювання випадкової величини  $\xi$  з нормальним законом розподілення, параметри якого  $a = 0, \sigma = 1$ , можна виконувати за формулою

$$\xi = \sqrt{\ln \gamma_1 \cos 2\pi \gamma_2}. \quad (2.60)$$

Перехід до довільних параметрів  $a$  і  $\sigma$  здійснюється за формулою

$$\eta = a + \sigma \xi,$$

де  $a$  - математичне очікування  $\eta$ ;

$\sigma$  – середньоквадратичне відхилення  $\eta$ .

$$P(\eta) = 1/(\sigma\sqrt{2\pi}) \exp\{-(\eta-a)^2/(2\sigma^2)\}. \quad (2.61)$$

### 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:

$$(P_k; a_k) = (0; a_0), (P_1; a_1), (P_2; a_2) \dots (1; a_n).$$

Розігрується  $\gamma_i$ ; визначається, на який відрізок  $(P_{k-1}; P_k)$  воно потрапило; визначаються відповідні  $(a_{k-1}; a_k)$ ; розраховується  $\xi_i$  за формулою

$$\xi_i = a_{k-1} + \gamma_i (a_k - a_{k-1}).$$

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  $i$ -ї заявки (назвемо його  $T_3$ ) лінія вільна, то вона приступає до обслуговування заявки, що продовжується  $\Delta t_{OB}$  хвилин ( $\Delta t_{OB}$  – час зайнятості лінії (тривалість обслуговування), величина випадкова). Якщо в момент часу  $T_3$  лінія зайнята, то система видає відмовлення. Потрібно визначити, скільки (у середньому) заявок обслуговує система за час  $T$  (це може бути 1 рік чи якийсь інший звітний період) і скільки відмовлень вона дасть.

Для одержання 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.

Найпростіший потік заявок. Вивчення потоків заявок у реальних умовах дозволило [13] виділити деякі випадки, що досить часто зустрічаються. Зупинимось на одному з них – найпростішому потоці.

Найпростішим потоком (чи потоком Пуассона) називається такий потік заявок, коли проміжок часу  $\tau$  між двома послідовними заявками являє собою випадкову величину, розподілену в інтервалі  $(0 - \infty)$  із густістю

$$p(X) = ae^{-aX}. \quad (2.62)$$

Цей закон розподілу називають також експонентним розподілом.

Легко обчислити математичне очікування

$$M\tau = \int_0^{\infty} X p(X) dX = \int_0^{\infty} X a e^{-aX} dX.$$

Після інтегрування вроздріб ( $u = x, dv = a e^{-ax} dx$ ) одержимо

$$M\tau = - X e^{-aX} \Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} e^{-aX} dX = - (1/a) e^{-aX} dX \Big|_0^{\infty} = 1/a, \quad (2.63)$$

де  $a$  - 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  $\tau$  між заявками розв'язок цієї простої задачі можна одержати 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 введемо деякі позначення:

$T_3$  і  $T_{3B}$  – моменти надходження заявки і звільнення каналу;

$\Delta t_3$  і  $\Delta t_{OB}$  – тривалість періоду часу між надходженням  $(i-1)$  і  $i$ -ї заявками і часу обслуговування  $i$ -ї заявки (випадкові величини з експонентним розподіленням);

$a_3$  і  $a_{OB}$  – параметри розподілу потоків заявок і обслуговування;

$N_{OB}$  і  $N_{ВД}$  – 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. 2.7.

Розрахунок починається з уведення даних: потрібної кількості реалізацій ( $N$ ) і їхньої тривалості ( $T$ ), а також параметрів законів розподілу інтервалів часу між надходженням заявок ( $a_3$ ) і тривалості обслуговування ( $a_{OB}$ ).

Далі обнуляються 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  $T_3 = 0 + 1/a_3$ . При цьому  $T_{3B} = 0$ .

У цей час реалізація ще не закінчилась і канал вільний. Розігрується час обслуговування  $\Delta t_{OB}$ , і визначається момент закінчення обслуговування:  $T_{3B} = T_3 + \Delta t_{OB} = 1/a_3 + \Delta t_{OB}$ . Кількість обслугованих заявок

збільшується на одиницю:  $N_{OB} = N_{OB} + 1 = 0 + 1$ . Потім розігрується інтервал часу до надходження наступної заявки  $\Delta t_3$  і розраховується момент її надходження:  $T_3 = T_3 + \Delta t_3 = 1/a_3 + \Delta t_3$ . Далі цикл повторюється.

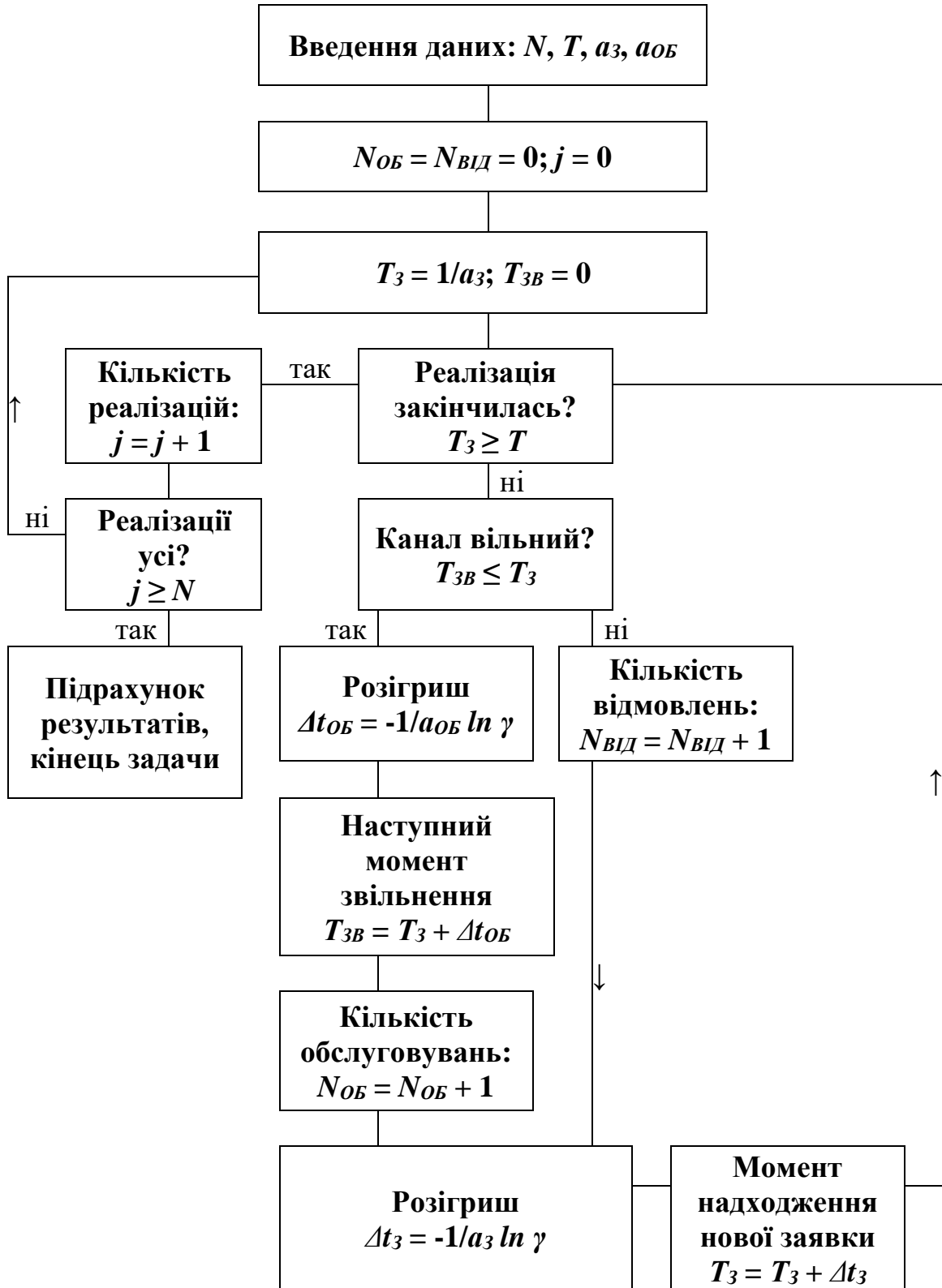


Рис. 2.7 – Блок-схема алгоритму розрахунку

Необхідно нагадати, що тут значок « $\Rightarrow$ » позначає оператор присвоєння, тобто запис  $N_{OB} = N_{OB} + 1$  позначає таке: до старого значення змінної  $N_{OB}$  додається 1 і цій змінній привласнюється нове значення, збільшене на 1 (відбувається накопичення). Те саме стосується і змінних  $T_3$ ,  $T_{3B}$  і всіх інших.

Припустимо, що обслужено вже багато заявок і надходить наступна в момент  $T_3$ . Тоді необхідно перевірити: чи закінчилася реалізація? Це встановлюється (див. рис. 2.7) шляхом порівняння  $T_3$  із заданою тривалістю реалізації  $T$ : якщо  $T_3$  більше чи дорівнює  $T$  – реалізація закінчилася, якщо менше – ні.

Якщо реалізація продовжується, то здійснюється перевірка зайнятості каналу шляхом зіставлення моменту надходження заявки  $T_3$  із моментом його звільнення  $T_{3B}$ : якщо  $T_{3B}$  менше або дорівнює  $T_3$ , то канал вільний; якщо більше – зайнятий.

Канал зайнятий: кількість відмовлень  $N_{ВД}$  збільшується на 1; розраховується  $\Delta t_3$  до наступної заявки за формулою (2.59); визначається момент надходження цієї заявки  $T_3$  і цикл повторюється.

Канал вільний: нова заявка встановлюється до причалу; розраховується її  $\Delta t_{OB}$  за формулою (2.59); визначається момент звільнення каналу  $T_{3B}$ ; кількість обслуговувань  $N_{OB}$  збільшується на 1; розігрується  $\Delta t_3$  до наступної заявки за формулою (2.59); 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  $T_{3B}$  обнуляється, а  $T_3$  привласнюється значення  $1/a_3$ . Після цього відтворюється (імітується) нова реалізація.

Реалізації відтворені всі, виконується підрахунок результатів моделювання за формулами:

$$n_{OB} = N_{OB} / N \quad \text{і} \quad n_{ВД} = N_{ВД} / N, \quad (2.64)$$

де  $n_{OB}$  і  $n_{ВД}$  – середня кількість обслужених заявок і середня кількість відмовлень за час  $T$ .

Формули (2.64) справедливі, оскільки в чарунках  $N_{OB}$  і  $N_{ВД}$  накопичувалася кількість обслуговувань і відмовлень по всіх реалізаціях.

При довільному розподілі  $\Delta t_3$  і  $\Delta t_{OB}$  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 поодинокі 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 урахується 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 перерізу й ширина припливу стічних вод?

29. Виходячи з яких умов визначається розмір комірок?
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.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

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. Voettger C.M., Smith H.J. The Nashville 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. Соболев 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 Паращук 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  $^{89}\text{Sr}$  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: ВПОЛ, 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.

Навчальне електронне видання

ЮРАСОВ СЕРГІЙ МИКОЛАЙОВИЧ

МОДЕЛЮВАННЯ ЕКОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Конспект лекцій

**Видавець і виготовлювач**

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, м. Одеса, 65016

тел./факс: (0482) 32-67-35

E-mail: [info@odeku.edu.ua](mailto:info@odeku.edu.ua)

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ДК № 5242 від 08.11.2016