

На правах рукопису

УДК 519.63:502.5(203):628.19

БІЛЯЄВ Микола Миколайович

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
ПОШИРЕННЯ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН
У ВОДНОМУ ТА ПОВІТРЯНОМУ
СЕРЕДОВИЩАХ**

05.13.02.— Математичне моделювання
в наукових дослідженнях

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора технічних наук





Дисертація є рукопис

Робота виконана в Дніпропетровському державному технічному університеті залізничного транспорту

Науковий консультант: доктор фізико-математичних наук,
професор ХРУЩ Віктор Кузьмич

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук,
професор СКОПЕЦЬКИЙ Василь Васильович,
доктор технічних наук,
професор ЛАВРИК Володимир Іванович,
дійсний член Академії технологічних наук України,
доктор фізико-математичних наук,
професор СЕЛЕЗОВ Ігор Тімофійович

Провідна організація - Національний технічний університет України
"Київський політехнічний інститут".

Захист відбудеться " 30 " жовтня 1996 р. о 14 год. на
засіданні спеціалізованої вченої ради Д 01.01.20 при Київському університеті
імені Тараса Шевченка за адресою: 252127, Київ-127, проспект Академіка
Глушкова, 6, факультет кібернетики, ауд. 40)

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці Київського
університету імені Тараса Шевченка (вул. Володимирська, 58).

Автореферат розісланий " 27 " вересня 1996 р.

Вчений секретар спеціалізованої вченої ради
кандидат фізико-математичних наук,
доцент

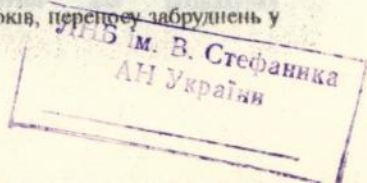
Зінько П.М.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Прогноз динаміки змін екологічного стану навколишнього середовища можливий лише на основі методу математичного моделювання. Підвищення якості прогнозної інформації вимагає врахування при розрахунках поширення забруднюючих речовин (ЗР) багатьох факторів, що робить задачу прогнозування далеко не тривіальною. Існуючі нормативні методики прогнозування якості водного та повітряного середовищ не дозволяють врахувати форму русел, джерел забруднення, рельєф, різноманітні форми викидів та ін., а тому мають суттєву обмеженість і низьку якість у застосуванні до практичних ситуацій. В даній роботі розв'язано важливу наукову проблему розробки методів моделювання, які адекватно відтворюють найбільш важливі фізичні процеси гідродинаміки та переносу ЗР у водоймах, підземних водах, атмосфері та повітряному просторі виробничих приміщень. Розроблено комп'ютерні методи, які дозволяють при обмежених ресурсах ПЕОМ на новому якісному рівні вирішувати проблемні задачі антропогенного забруднення водного та повітряного середовищ (ВПС).

Мета роботи. Розробка нових ефективних методів розв'язування широкого класу практичних задач, які стосуються проблем охорони навколишнього середовища; створення регуляторних комп'ютерних моделей і комплексів програм для розрахунку на ПЕОМ процесів поширення ЗР у ВПС, що дозволяють на новому рівні прогнозувати якість вод, атмосфери і повітряного простору всередині виробничих приміщень. Ця мета передбачає розв'язання наступних задач:

- побудова ефективних неявних різницевих алгоритмів з корекцією величини схемної похибки для інтегрування рівнянь гідродинаміки водних та повітряних потоків, процесу забруднень у



водному та повітряному середовищах і розробка на їх основі спеціалізованого програмного забезпечення обчислювального експерименту - комплексів програм (КП) для прогнозу якості вод і повітря;

- розв'язування на базі розроблених методів прикладних задач про забруднення проточних водоєм складної геометричної форми, підземних вод через скид шахтних та промислових стічних вод;

- розв'язування практичних задач про розсіювання ЗР в атмосфері від різних джерел з врахуванням типу техногенного вибросу, рельєфу місцевості, форми джерела, присутності будівель, метеумов;

- дослідження закономірностей поширення ЗР в робочих зонах приміщень і підземних виробках у випадку стаціонарних, циклічних та залпових викидів;

- теоретичне обґрунтування, підтвердження достовірності і точності розрахунків за розробленими методами.

Методика дослідження ґрунтується на чисельному експерименті з математичними моделями різного рівня, котрі описують перенесення ЗР у повітряному і водному середовищах. При розв'язуванні рівнянь на ПЕОМ використовуються нові різницеві алгоритми чисельного інтегрування з корекцією величини схемної похибки у процесі обчислювального експерименту.

Наукова новизна. Внаслідок проведених в роботі досліджень одержано такі нові результати:

- розроблено комплексний підхід до математичного описання різноманітних фізичних процесів поширення забруднюючих речовин у водному та повітряному середовищах, який ґрунтується на базі дискретних балансових співвідношень для контрольного елемента;

- розроблено нові ефективні дискретні алгоритми для чисель-

ного моделювання одно- і двовимірних гідродинамічних течій у відкритих руслах. Вони дозволяють розв'язувати багатофакторні задачі про забруднення водойм з детальним урахуванням особливостей русла: геометричної форми берегів, наявності приток, островів, водозаборів, регулювання стоку та ін.;

- розроблено ефективні неявні алгоритми для розрахунку поширення забруднюючих речовин у повітрі. На основі алгоритмів створено комплекс комп'ютерних методів прогнозування якості атмосфери і повітряного середовища у робочих зонах виробничих приміщень;

- розроблено ефективний алгоритм розрахунку процесів гідродинаміки та поширення забруднень в атмосфері з урахуванням рельєфу місцевості, метеофакторів, форми вогнищ забруднення, наявності забудови, типу викидів;

- запропоновано нові методики побудови нелінійних квазі-монотонних різницевих схем, які адаптуються до поля розрахованих параметрів за рахунок використання в алгоритмі антидифузійного кроку, що дозволяє зменшити величину схемної дифузії у процесі проведення обчислювального експерименту;

- створено спеціалізоване програмне забезпечення для обчислювальних експериментів, яке охоплює різноманітні чисельні моделі гідродинаміки течій і розсіювання забруднюючих речовин у водному та повітряному середовищах;

- розв'язано ряд важливих прикладних задач для Придніпровського регіону стосовно дослідження перенесення забруднень у воді та повітрі.

На захист виноситься:

- чисельні моделі і алгоритми для розрахунку

гідрогазодинамічних процесів переносу забруднюючих речовин у водному та повітряному середовищах, які представляють нові ефективні методи розв'язування актуальних наукових задач охорони навколишнього середовища;

- КП "Прогноз-1", "Прогноз-2", "Прогноз-3", "Аспірація" для прогнозування якості атмосфери;

- КП "Акваторія", "Водойма", "Водойма-2", "Виїмка", "Водовідстійник" для прогнозування якості поверхневих і підземних вод;

- результати багатоваріантних розрахунків поширення ЗР у поверхневих і підземних водах, атмосфері та повітряному середовищі виробничих приміщень;

- обґрунтування ефективності, економічності розроблених програмних засобів.

Достовірність одержаних у роботі результатів заснована на застосуванні фізично обґрунтованих математичних моделей; коректній постановці крайових задач; строгому математичному описанні розглянутих різницевих алгоритмів; копіткому методичному дослідженні алгоритмів і програм на широко відомих тестових завданнях; дослідженні збіжності чисельних розв'язків; зіставленні чисельних розрахунків з теоретичними, експериментальними даними і результатами інших авторів.

Практична цінність. Розроблено чисельні моделі і алгоритми реалізовані у вигляді КП, які на новому якісному і кількісному рівні дозволяють оперативно прогнозувати антропогенне навантаження на навколишнє середовище від промислових підприємств чи інших об'єктів з метою вироблення науково обґрунтованих природоохорон-

них заходів. Запропоновані нові комп'ютерні технології є економічними, універсальними і мають широкий "робочий" діапазон, зручні для практичного використання, дозволяють замінити в багатьох випадках дороге фізичне моделювання. Розроблена у роботі теоретична база і методологія побудови алгоритмів може бути використана для створення нових ефективних методів розрахунку розсіювання ЗР у різних природних середовищах.

Реалізація результатів роботи. Розроблені комплекси програм використовуються в регіональному проектно-дослідницькому інституті "Дніпрогіпроводгосп" при проведенні розрахунків в рамках програми розробки комплексу заходів з метою запобігання шкідливому впливу скиду шахтних вод ВО "Павлоградвугілля" на природне середовище. Розроблені методи та комплекси програм використовуються для розв'язання екологічних задач на Павлоградському механічному заводі, в Дніпропетровському НДІ великогабаритних шин, Українському науковому центрі технічної екології (Донецьк), в КБ "Південне" (Дніпропетровськ), в проектному інституті "Дніпрогіпрошахт" (Дніпропетровськ), ДержНДІ ХП (Шостка), ВО "Десна" (Шостка). Впровадження результатів дисертації в практику підтверджено актами впровадження. Результати роботи використовувались при виконанні ряду господарчодоговірних тем. Робота виконана в межах науково-технічної проблеми ДКНТ і Держплану СРСР 085.04 "Створити і впровадити ефективні методи і засоби контролю забруднення навколишнього середовища" та плану НДР ДДУ "Чисельне моделювання течій рідини і газу на базі зміннотрикутних різницевих схем і розробка комп'ютерних моделей забруднення повітряного середовища та водного басейну Дніпра" (№ Держ

рег. 00194V010128-22.03.94). Матеріали роботи увійшли в навчальний посібник "Чисельний розрахунок поширення аерозольних забруднень", використовуються в навчальному процесі Дніпропетровського державного університету, Дніпропетровського державного технічного університету залізничного транспорту, Донецького державного університету.

Апробація роботи. Результати дисертаційної роботи були представлені на 20-ти Всесоюзних, Міжнародних конференціях і семінарах, у тому числі: науковому семінарі "Чисельні методи механіки суцільного середовища" під кер. проф. В.М.Ковені, Інститут теоретичної та прикладної механіки СБ АН СРСР (Новосибірськ, 1986); Першій і Другій Всесоюзних конференціях "Актуальні питання охорони навколишнього середовища від антропогенного впливу" (Севастополь, 1989, 1990); Всесоюзній конференції "Математичне моделювання і експериментальні методи дослідження фізико-хімічних процесів у суцільних середовищах" (п. Рибачье, 1989); Всесоюзному семінарі "Проблеми фізико-хімічних взаємодій в механіці суцільних середовищ" (Ужгород, 1989); Міжнародній конференції "Теорія наближення та задачі обчислювальної математики" (Дніпропетровськ, 1993); Першому міжнародному симпозиумі "Ecosystem Health & Medicine" (Онтаріо, 1994); 6-th International Conference on Numerical Methods" (Будапешт, 1994); Першому міжнародному конгресі ІАС'94 "International Aerospace Congress" (Москва, 1994); 12-му Всесвітньому конгресі "Agricultural Engineering" (Мілан, 1994); 45-th International Astronautical Congress (Іерусалим, 1994); 1-й Міжнародній конференції "Чисельні методи в гідравліці і гідродинаміці" (Донецьк, 1994); Міжнародній научно-

технічній конференції "Екологія хімічних виробництв" (Северодонецьк, 1994); International Rubber Conference (Москва, 1994), International Congress "Water: Ecology and Technology" (Москва, 1994) Fifth International Congress of Fluid Mechanics (Каїр, 1995), науковому семінарі Інституту гідромеханіки НАН України (1995), науковому семінарі Інституту природокористування та екології НАН України (Дніпропетровськ, 1995).

Комплекси прикладних програм комп'ютерного моделювання переносу ЗР у повітрі демонструвались на виставці-ярмарці завершених наукових робіт вузів України (Київ, 1993).

Публікації: за темою дисертації опубліковано 67 робіт.

Обсяг і структура роботи. Дисертація складеться з вступу, шести глав, висновку, списку літератури і додатку. Робота містить 345 сторінок машинописного тексту, 168 рисунків, 6 таблиць. Список літератури включає 306 назв.

Особистий внесок автора. Дисертація є самостійною працею автора. У роботах, написаних у співавторстві, здобувачем розроблено математичну модель, чисельний алгоритм, виконано розрахунки на ЕОМ, проведено обробку результатів обчислювального експерименту.

Зміст роботи.

У вступі визначена актуальність і мета роботи, викладається короткий зміст дисертації і обговорено стан досліджуваної проблеми.

У першій главі розглянуто математичні моделі розсіювання ЗР у атмосфері і повітрі виробничих приміщень. Для опису розсіювання ЗР у атмосфері в локальному масштабі використовується наступне

рівняння відносно концентрації φ забруднюючої речовини

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

де u, v, w - компоненти вектора швидкості повітряного потоку, w_s - швидкість гравітаційного осідання частинок, σ - коефіцієнт хімічного розкладення забруднення; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ - коефіцієнт турбулентної дифузії; q_i - інтенсивність точкових джерел забруднення; $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ - місцеположення точкових джерел забруднення; $\delta(r - r_i)$ - дельта-функція Дірака.

На основі рівняння (1) та розробленого алгоритму створено КП "Прогноз-1".

Для математичного моделювання далекого переносу забруднень у атмосфері використовується рівняння

$$\frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial t} + \frac{\partial u \bar{\varphi}}{\partial x} + \frac{\partial v \bar{\varphi}}{\partial y} + \bar{\sigma} \bar{\varphi} = \operatorname{div}(\mu \nabla \bar{\varphi}) + \sum_{i=1}^N q_i(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i), \quad (2)$$

де $\bar{\varphi}(x, y) = \frac{1}{H} \int_0^H \varphi(x, y, z) dz$ - усереднене по висоті H значення концентрації ЗР у одиниці об'єму повітря. Коефіцієнт $\bar{\sigma}$ в моделі (2) визначає наступні процеси: хімічне перетворення ЗР; вимивання опадами та гравітаційне осадження частинок ЗР; турбулентний обмін у приграничній зоні біля підстилюючої поверхні.

На основі математичної моделі (2) та розробленого алгоритму створено КП "Прогноз-2".

Для визначення полів концентрації забруднень всередині виробничих приміщень та робочих зон, розрахунку оптимального об'єму видаленого місцевим відсисанням повітря для вибраної схеми установки відбору з урахуванням взаємного розташування техноло-

гічного устаткування, використовується рівняння

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_c) \varphi}{\partial z} + \sigma \varphi =$$

$$= \operatorname{div}(\mu \nabla \varphi) + \sum_{i=1}^N q_i(t) \delta(r - r_i(t)) - \sum_{j=1}^M \varphi Q_j(t) \delta(r - r_j) \quad (3)$$

яке доповнюється формулою розрахунку швидкості повітря за рахунок роботи місцевих відсосів

$$\vec{v} = \sum_{j=1}^M \frac{Q_j}{4\pi} \left(\operatorname{grad} \frac{1}{\sqrt{|x - x_j|^2 + |y - y_j|^2 + |z - z_j|^2}} + \right.$$

$$\left. + \operatorname{grad} \frac{1}{\sqrt{|x - x_j|^2 + |y - y_j|^2 + |z + z_j|^2}} \right),$$

де $q_i(t)$ - інтенсивність точкового джерела викиду ЗР; Q_j - об'ємна витрата точкового просторового стоку (місцевого відсосу); $r_j = (x_j, y_j, z_j)$ - координати відсосу. На базі моделі (3) створено КП "Аспірація".

У першій главі обговорюються моделі і підходи до визначення метеорологічних і фізичних параметрів, залучених у рівняння (1)-(3).

Оскільки метою роботи є створення програмних засобів розв'язування багатовимірних задач забруднення повітряного і водного середовищ із різними початковими і крайовими умовами, то в другій главі розроблено теорію побудови надійних, ефективних і зручних методів програмування алгоритмів розв'язування задач розглянутого класу.

В п. 2.1-2.4 виділено основні вимоги, поставлені до різницьких апроксимацій диференціальної задачі, а також розроблено загальну методологію побудови неоднорідних нелінійних різницьких алгоритмів з мінімальними дифузійними похибками, достатніми для збе-

реження монотонних профілів розподілу шуканих параметрів. Проведено аналіз відомих алгоритмів інтегрування за часом. Розглянуто нову організацію алгоритмів інтегрування рівнянь (1)-(3) за часовою координатою. Виділено неявну змінно-трикутну схему (ЗТС), яка забезпечує ефективний розрахунок, і показано методи підвищення порядку апроксимації за рахунок алгоритмів корекції потоків і використання антидифузійного кроку.

У п. 2.5 побудована базова чотирикорова ЗТС для чисельного інтегрування двовимірного рівняння переносу забруднюючої речовини. В операторній формі різницевого рівняння для моделі (2) на кожному кроці розщеплення може бути записане у вигляді:

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_{ij}^k - \varphi_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^\pm \varphi^k + L_y^\pm \varphi^k) + \frac{\sigma}{4} \varphi_{ij}^k = \\ & = \frac{\bar{\mu}}{4} (M_{xx}^\pm \varphi^k + M_{xx}^\pm \varphi^c + M_{yy}^\pm \varphi^k + M_{yy}^\pm \varphi^c) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}_l}{4} \delta_l, \end{aligned} \quad (4)$$

де $k = n+1/4; n+1/2; n+3/4; n+1$ - верхній часовий шар; $c = n; n+1/4; n+1/2; n+3/4$ - нижній часовий шар;

$\bar{\mu}$ - збурений коефіцієнт дифузії, $\bar{\mu}_{i,x} = \mu_x \cdot \left(1 + \frac{u^+ \Delta x}{\mu_x}\right)^{-1}$.

Різницеві оператори L_x^\pm, L_y^\pm апроксимують конвективні похідні з врахуванням напрямку переносу ЗР

$$L_x^+ \varphi^{n+1} = \frac{\partial u^+ \varphi}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}^+ \varphi_{ij}^{n+1} - u_{ij}^+ \varphi_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \quad (5)$$

Швидкість переносу ЗР подається у вигляді суми знакосталих

величин $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$, $u^- = \frac{u - |u|}{2}$.

Для апроксимації других похідних використовуються два часових шари (за методом В.К.Саульєва). На верхньому часовому шарі апроксимується та частина похідної, яка "узгоджується" з напрямом розділеної різниці при заміні конвективної похідної, в операторній формі ця апроксимація записується так.

$$M_{xx}^- \varphi^{n+1} + M_{xx}^+ \varphi^{n+1} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \approx \frac{\varphi_{i+1,j}^{n+1} - \varphi_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \frac{\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2}. \quad (6)$$

На кожному кроці розщеплення враховується лише один напрямок переносу ЗР за координатними напрямками.

З огляду на те, що на кожному кроці розщеплення шаблон неявних різницьових рівнянь на верхньому часовому шарі має трикутну форму, невідоме значення функції φ визначається за методом біжучого рахунку. Явні рекурентні формули для визначення невідомого значення концентрації φ забезпечують високу ефективність алгоритму, малі витрати машинного часу на розв'язування просторових задач при збереженні абсолютної стійкості.

Різноманітна фізична постановка задач розглянутого класу (поширення ЗР від постійно діючих джерел викидів, циклічно діючих і т.ін.) привела до необхідності виділення у окремий розрахунковий крок джерельних доданків, що дозволило зробити алгоритм розрахунку більш гнучким і універсальним. Даний варіант ЗТС для рівняння (2) побудовано у п. 2.6.

Чисельний розв'язок тривимірних задач переносу забруднень з допомогою ЗТС будуватиметься аналогічно описаній вище схемі, при ал-

роксимациї конвективних похідних у розробленій схемі використовується проміжний шар за типом схеми Кранка-Нікольсона. В операторній формі різницеві рівняння мають вигляд:

$$\begin{aligned} & \frac{\left(\begin{smallmatrix} k & c \\ \varphi_{ijk} - \varphi_{ijk} \end{smallmatrix} \right)}{\Delta t} + \left(L_x^\pm + L_y^\pm + L_z^\pm \right) \left(\begin{smallmatrix} k & c \\ \varphi_{ijk} \xi + \varphi_{ijk} (1 - \xi) \end{smallmatrix} \right) + \frac{\sigma}{4} \frac{\left(\begin{smallmatrix} k & c \\ \varphi_{ijk} + \varphi_{ijk} \end{smallmatrix} \right)}{2} = \\ & = \frac{1}{4} \bar{\mu}_1 \left[\left(M_{xx}^\pm + M_{yy}^\pm + M_{zz}^\pm \right) \begin{smallmatrix} k \\ \varphi_{ijk} \end{smallmatrix} + \left(M_{xx}^\mp + M_{yy}^\mp + M_{zz}^\mp \right) \begin{smallmatrix} c \\ \varphi_{ijk} \end{smallmatrix} \right], \end{aligned}$$

де $0 \leq \xi \leq 1$ - параметр, що визначає проміжний шар при обчисленні конвективних похідних. На кожному кроці розщеплення знак " \pm " вибирається у відповідності з напрямком конвективного переносу ЗР.

Для створення гнучкого алгоритму розв'язування задач з різною фізичною постановкою виділено окремий п'ятий крок для розрахунку змін концентрації ЗР під дією джерел і стоків у розрахунковій області. Розрахункове співвідношення для цього кроку алгоритму одержано за методом балансу шляхом інтегрування рівняння з дельта-функцією на різницевій комірці

$$\frac{\varphi_{ijk}^{s_{n+1}} - \varphi_{ijk}^{s_n}}{\Delta t} = \sum_{l=1}^N \frac{q_l(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \delta_l - \sum_{m=1}^M \frac{\varphi_{ijk}^{s_{n+1}} + \varphi_{ijk}^{s_n}}{2} \frac{Q_m(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \delta_m.$$

У дискретному вигляді дельта-функція Дірака "розмазується" по об'єму різницевої комірки зі збереженням сумарної кількості викинутого (для джерела) чи відсмоктаного (для стоку) забруднення.

При значенні $\xi=1$ схема має перший порядок точності, а при $\xi=1/2$ - другий; послідовність розв'язування різницевих рівнянь, незважаючи на їх некомутативність, забезпечує другий порядок точності за часом, що відповідає схемі, запропонованій Г.І.Марчуком. При

односторонній апроксимації похідних забезпечується монотонність профіля розв'язку, однак має місце велика схемна в'язкість. Розроблені у п. 2.4 методи корекції потоків дозволяють зменшити величину схемної в'язкості при односторонній апроксимації конвективних похідних. Методика розрахунку корекції потоків виділена у окремий модуль розроблених програмних засобів. Необхідно відзначити, що для розглянутого класу задач існує нестача у вхідній інформації (задання коефіцієнтів σ , μ і т.д.), що обумовлено низкою причин і, зокрема, слабкою системою моніторингу навколишнього середовища. У цьому випадку при проведенні обчислювального експерименту, а також при виконанні "пілотних" розрахунків має сенс вести розрахунок за схемами I-го порядку точності без залучення програмного модуля корекції потоків. Як показали тестові розрахунки і порівняння з експериментальними і розрахунковими даними інших авторів, розрахунок за схемами I-го порядку забезпечує необхідну для інженерних розрахунків точність. При наявності повної надійної бази вхідних даних для моделі з метою детального описання розподілу домішок має сенс виконувати обчислювальний експеримент з обліком корекції потоків.

У п. 2.8, 2.9 проведено методичні дослідження побудованих різницевих алгоритмів. Методом Неймана і методами теорії диференціальних наближень досліджено питання апроксимації та стійкості алгоритмів. Проведено порівняння результатів розрахунків за розробленими алгоритмами з аналітичними розв'язками рівнянь конвективного і дифузійного переносу ЗР, з розрахунками В.М.Ковсні, експериментальними даними Р.В.Озмідова (рис. 1,а). Проведено методичні дослідження чисельних алгоритмів, які дозволили зробити висновок про високу точність, надійність і економічність розроблених ЗТС для чи-

сельного розв'язування задач про поширення ЗР у повітряному і водному середовищах.

У третій главі розглянуто (п. 3.1) загальні вимоги, що ставляться до вентиляційних мереж промислових цехів, і підходи до теоретичного описання процесів вентиляції.

Побудовано комп'ютерні моделі конкретних задач і розглянуто техніку моделювання розсіювання ЗР у виробничих приміщеннях з допомогою КП "Аспірація". Досліджено розподіл забруднення в робочій зоні і визначено ефективність роботи місцевого відсосу при різному розташуванні його по відношенню до джерела утворення шкідливої речовини (п. 3.2). Розв'язок задачі приведено для одного і двох відсосів, розташованих різним чином по відношенню до джерела забруднення.

Ряд джерел викиду ЗР на виробництві діє циклічно на протязі технологічного процесу. У п. 3.3 розглянуто моделювання процесу видалення шкідливих домішок з робочої зони циклічно діючого устаткування (дозаторів). Методом обчислювального експерименту досліджено вплив розташування місцевих відсосів на якість повітря на робочих місцях; досліджено ефективність роботи відсосів; прослідковано зміни інтенсивності забруднення повітря на робочих місцях з плином часу. У п. 3.4 проведено розрахунок поширення забруднень від системи розподілених у просторі приміщення джерел забруднювачів. Ілюструється можливість застосування КП для прогнозу якості повітряного середовища у приміщенні на етапі проектування місцевої витяжної мережі для джерел із змінною інтенсивністю викиду, розташованих "складним" чином у приміщенні. Зроблено аналіз якості повітря і досліджено ефективність роботи відсосів.

У п. 3.5 розглянуто моделювання поширення ЗР від рухомого у робочому приміщенні джерела-забруднювача зі сталою та змінною в часі інтенсивністю викиду. Виконано прогноз формування зони забруднення повітряного середовища і проведена оцінка ефективності роботи витяжних відсосів, розташованих по-різному в приміщенні.

Відомо, що забруднення повітря у робочих приміщеннях може бути визване залповим викидом від технологічного устаткування. У п. 3.6 показана можливість застосування КП "Аспірація" для розв'язання задач такого класу. Методом обчислювального експерименту "реалізується" "сценарій" технологічного викиду, визначається ефективність роботи відсосів у залежності від їх положення відносно джерел викиду забруднювачів, досліджується динаміка змін інтенсивності забруднення повітря в приміщенні з плином часу (рис. 4,а).

В четвертій главі розглянуто математичні моделі конкретних задач і техніка дослідження процесів розсіювання забруднень у атмосфері-з допомогою КП "Прогноз-1", "Прогноз-2", "Прогноз-3".

Моделювання процесу далекого переносу ЗР у атмосфері (п. 4.1) здійснено в задачі про поширення антропогенних викидів міст і промислових центрів одного з найбільших регіонів України - Придніпров'я-Донбас. Як джерела забруднення вибрані промислові населені пункти Придніпров'я і Донбасу з населенням понад 30 тис. чоловік. Подаються результати забруднення атмосфери для різних напрямків вітру.

Однією з важливих прикладних задач є прогноз забруднення повітряного басейну при аваріях чи інших надзвичайних ситуаціях, пов'язаних зі значним викидом токсичних речовин у атмосферу. Вирізною особливістю таких процесів є їх нестационарність. Можли-

вість застосування КП "Прогноз-2" для розв'язування задач даного класу проілюстрована у п. 4.2 і 4.3. В п. 4.2 розглянуто поширення шкідливих речовин у атмосфері при "залповому" викиді у випадку імовірної аварії на великому газосховищі. Досліджено динаміку поширення хмари ЗР при змінних напрямках переміщень повітряних мас. У п. 4.3 представлено результати моделювання прогнозу формування зони забруднення повітря при значній аварії на ряді промислових об'єктів за допомогою КП "Прогноз-2". Розглядається статистичний "сценарій" забруднення повітряного середовища при нестационарному процесі викиду забруднювачів.

У п. 4.4-4.6 показано застосування КП "Прогноз-1" для розв'язування задач у різних фізичних постановках для прогнозу забруднення атмосфери і підстилаючої поверхні у випадку стаціонарного і нестационарного викиду ЗР в повітря з урахуванням просторового переносу домішок. Додатково до математичного обґрунтування розроблених різницевих схем (глава II) у п. 4.4 зроблено порівняння результатів розрахунку за розробленими алгоритмами з даними експерименту і розрахунковими методиками М.Е. Берлянда. У даному параграфі представлено результати розрахунку просторового розсіювання домішки в атмосфері від стаціонарного джерела забруднення, розташованого на висоті H . У п. 4.5 досліджено нестационарний просторовий перенос пилового забруднювача у атмосфері після вибуху.

В п. 4.6 розроблено алгоритм розрахунку розсіювання ЗР в умовах забудови. Для опису гідродинаміки течії між будинками використовується модель вихрової течії невязкої рідини

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \omega u}{\partial x} + \frac{\partial \omega v}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = -\omega, \quad (7)$$

а процес розсіювання ЗР описується рівнянням турбулентної дифузії домішки. Для чисельного інтегрування рівняння переносу завихреності використовується ЗТС розщеплення виду (4) без дифузійних складових. Для розв'язування рівняння Пуассона використовується ідея встановлення розв'язку за фіктивною часовою координатою, а алгоритм розв'язування розглянуто в п. 5.10. При розрахунках припускається, що відрив потоку в кутових точках споруд приводить до утворення вихорів, інтенсивність яких розраховується. Розрахункова область формується на прямокутній різницевій сітці, де використовуються маркери, що модулюють геометричну форму будівель. Таким чином, форма будівель подається як прямокутні багатокутники різної геометричної форми. На базі даної моделі створено КП "Прогноз-3", який може бути використаний також для розрахунку розсіювання ЗР з урахуванням обтікання рельєфу та провітрювання виробничих приміщень. Представлено результати розрахунку розсіювання ЗР в умовах забудови на проммайданчику аглофабрики. Досліджено вплив типу викиду (низький, високий, вентиляційний), геометричної форми будівель на формування, інтенсивність зони забруднення атмосфери та процес аерації проммайданчика.

В п. 4.7 розв'язано задачу про забруднення повітряного басейну від задимленого хвостосховища. Досліджено вплив рельєфу місцевості, метеофакторів і місцеположення хвостосховища на формування, інтенсивність та розміри зони забруднення. Наведено результати дослідження забруднення атмосфери від хвостосховища, розташованого в ярузі, з урахуванням геометричної форми вогнища

забруднення та форми яруги.

В п. 4.8. наведено розв'язування задачі про провітрювання підземної камероподібної виробки складної форми при роботі в ній двох дизельних агрегатів. Визначено поле концентрації домішок у виробці, форма та розміри утвореної зони забруднення. Розв'язано задачу про провітрювання виробки після залпового викиду ЗР. Проведено порівняння результатів розрахунку з експериментальними та чисельними даними Г.В.Калабіна, А.А.Бакланова, П.В.Амосова.

В п. 4.9 досліджено динаміку забруднення атмосфери при рухові пилової хмари в кар'єрі. Дослідження еволюції форми зони забруднення, її інтенсивності та розмірів виконано з урахуванням метеофакторів, геометричної форми кар'єру та форми утвореної вибухом хмари (рис. 2). Розрахунок проведено для двох різних за інтенсивністю вибухів. Проведено порівняння розрахунків з даними Б.В.Плюхіна, А.А.Фалейчик (СВ АН СРСР).

У п'ятій главі побудоває різницеві алгоритми і КП розрахунку гідродинаміки течій і транспорту забруднень у акваторії рік та підземних водах; вироблена постановка і техніка моделювання широкого кола задач прогнозу якості вод на основі розроблених КП.

Для описання гідродинаміки течій і транспортування забруднень у проточних водоймах у роботі розроблено три моделі. Перша модель орієнтована на розв'язування задач прогнозу якості води у акваторіях рік великої протяжності. Дана модель (п. 5.1, п. 5.2) ґрунтується на одновимірних нестационарних рівняннях гідравліки, у яких шуканими величинами є об'ємна витрата води Q і площа живого перерізу S

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = R(U), \quad (8)$$

$$\text{де } U = \begin{vmatrix} S \\ Q \end{vmatrix}; F = \begin{vmatrix} Q \\ \frac{Q^2}{S} + \frac{g}{2} P(S) \end{vmatrix}; R = \begin{vmatrix} q \\ g \sin \alpha S - \frac{c_f}{2} b_0 \frac{Q|Q|}{S^2} \end{vmatrix},$$

α - нахил дна русла; доданок q враховує притік підземних, дощових чи талих вод а також притік рік у русло; b_0 - характерна ширина русла.

Дані про нестационарну гідродинаміку течії використовуються в задачі про поширення забруднень, котрі попадають у русло при технологічних викидах забруднених вод від промислових підприємств, розташованих у басейні даної ріки. Для розрахунку концентрації забруднення в руслі використовується рівняння

$$\frac{\partial \varphi S}{\partial t} + \frac{\partial \varphi Q}{\partial x} + \sigma \varphi S = \mu S \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \varphi_d q_d + g_1 \delta(x - \bar{x}_1) + \varphi_p Q_p \delta(x - x_p), \quad (9)$$

де φ - концентрація забруднення; $\sigma = \sigma_x + \sigma_s$ - коефіцієнт, що враховує хімічний чи біологічний розпад забруднень і зниження концентрації забруднення у потоці при осадженні вагомих забруднень на дно русла; φ_d - концентрація забруднень при стоку дощових вод; $q_d(t)$ - кількість дощових вод, які попадають у русло; g_1 - кількість забруднень, які попадають у русло в точці x_1 ; зосередженого викиду забруднених вод; φ_p - концентрація забруднювачів у притоці; Q_p - витрата води у притоці, яка моделюється зосередженим джерелом з геометричною координатою x_p .

На базі диференціальної моделі поширення забруднень по довжині русла (9) і рівнянь (8) створено КП "Акваторія".

У п. 5.3 побудовано різницьві алгоритми розрахунку одиницево-мірних нестационарних течій у відкритих руслах. Описано два алгоритми розрахунку - явний і неявний. Оскільки вихідна система

рівнянь (8) є нелінійною, то для побудови неявного алгоритму застосовується лінеаризація рівнянь відносно приросту розв'язку на малому часовому кроці, виділяються матриці конвективного переносу, які представляються у вигляді суми знакосталих матриць, що дозволяє адекватно описати напрям процесу переносу збурень. Схема розщеплення для організації неявного алгоритму виглядає так

$$\frac{\partial \Delta U^1}{\partial t} - B \Delta U^1 = -\frac{\partial F^n}{\partial x} + R^n \quad \frac{\partial \Delta U^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (A^+ \cdot \Delta U^2) = 0$$

$$\frac{\partial \Delta U^3}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (A^- \cdot \Delta U^3) = 0,$$

де $A = A^+ + A^-$ - знакосталі матриці: $A = \left(\frac{\partial F}{\partial U} \right)^n$, $B = \left(\frac{\partial R}{\partial U} \right)$.

Для забезпечення другого порядку точності за часом використовуються двоциклічне розщеплення.

$$\frac{\partial \Delta U^1}{\partial t} + \frac{1}{2} A_1 \Delta U^1 = \frac{1}{2} f_1;$$

$$\frac{\partial \Delta U^2}{\partial t} + \frac{1}{2} A_2 \Delta U^2 = 0; \quad \frac{\partial \Delta U^3}{\partial t} + A_3 \Delta U^3 = 0;$$

$$\frac{\partial \Delta U^4}{\partial t} + \frac{1}{2} A_2 \Delta U^4 = 0; \quad \frac{\partial \Delta U^5}{\partial t} + \frac{1}{2} A_1 \Delta U^5 = \frac{1}{2} f_1;$$

де $A_1 = (-B)$; $A_2 = \frac{\partial}{\partial x} (A^+)$; $A_3 = \frac{\partial}{\partial x} (A^-)$.

Для чисельного інтегрування даної системи використовується неявна схема "проти потоку". При розрахунку гідродинаміки течії, коли необхідно враховувати дрібномасштабні зміни розв'язку за часом, застосовується явний алгоритм, записаний у вигляді

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{\left[(\hat{A}_{i+1/2}^+)^n U_i^n - (\hat{A}_{i-1/2}^+)^n U_{i-1}^n \right]}{\Delta x_i} +$$

$$+ \frac{\left[(\hat{A}_{i+1/2}^-)^n U_{i+1}^n - (\hat{A}_{i-1/2}^-)^n U_i^n \right]}{\Delta x_i} = R_i^n .$$

При апроксимації конвективних похідних як у явному, так і у неявному алгоритмах використовуються односторонні апроксимації. Для підвищення точності розрахунку гідродинаміки течії використовується додатковий програмний модуль, який реалізує описану в другій главі методику зниження дифузійних похибок.

Алгоритм розрахунку течії в основному руслі ріки складається з послідовного розрахунку течії на кожній з ділянок розбиття основного русла. Коли необхідно обрахувати течію і по притоках, то кожна притока розглядається як нова ділянка.

Обчислене значення параметрів S і Q є базою для визначення розподілу ЗР по руслу ріки. Чисельне інтегрування рівняння транспортування забруднювачів у ріці аналогічне до підходу, який використано у другій главі для побудови алгоритму розрахунку переносу домішки у повітряному середовищі. Неявна схема розв'язування рівняння (9) має вигляд

$$\frac{(S\varphi)_i^{n+1} - (S\varphi)_i^n}{\Delta t} + \frac{(Q^+\varphi)_i^{n+1} - (Q^+\varphi)_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + 6S\varphi_i^{n+1} =$$

$$= \mu S \frac{\varphi_{i+1}^n - \varphi_i^n - \varphi_i^{n+1} + \varphi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + f .$$

Математичні моделі розрахунку гідродинаміки течій і транспортування забруднень у системі русел на базі моделей (8), (9)

орієнтовані на розв'язання задач прогнозу якості води у р. Дніпро. Для обґрунтування точності розробленої моделі вибрано задачу про моделювання проходження хвилі в горизонтальному каналі при зруйнуванні греблі. Результати розгляду задачі за розробленим алгоритмом порівнюються з розрахунком С.К.Годунова і аналітичним розв'язком, зроблено висновок про достатню для інженерної практики точність розрахунків за розробленою моделлю.

У п. 5.5 КП "Акваторія" використана для розв'язування ряду прогнозних задач про перенесення забруднень по руслу ріки Дніпро для різноманітних фізичних ситуацій (залповий викид ЗР, викид від стаціонарних джерел тощо) (рис. 4,г).

КП "Акваторія" засновано на одновимірній моделі гідродинаміки течії і транспортування домішок у акваторії рік великої протяжності з регулюванням стоку на греблях. На практиці часто необхідно здійснити прогноз забруднення поверхневих вод на деякій ділянці водотоку поблизу від джерел викиду ЗР у водойму. В цьому випадку для адекватного прогнозу якості води в руслі необхідно при розрахунку гідродинаміки течії і переносу домішки враховувати геометрію русла ріки в плані, наявність приток (стоків), островів в руслі та ін. З цією метою у п. 5.6, 5.7 розглянуто математичну модель гідродинаміки течії і переносу ЗР у водоймах, де використовуються рівняння Нав'є-Стокса і допущення теорії "мілкої води":

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \omega u}{\partial x} + \frac{\partial \omega v}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right), \quad (10)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega. \quad (11)$$

Для описання процесу транспортування ЗР у водоймі править рівняння

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \varphi u}{\partial x} + \frac{\partial \varphi v}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pe}} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) \quad (12)$$

У п. 5.8, 5.9 побудовано різницевий алгоритм розрахунку гідродинаміки течій у водоймах. Реалізація алгоритму здійснюється на прямокутній рознесеній сітці: функція току визначається у вузлах різницевої сітки, завихреність - у центрах, компонента швидкості u - на вертикальних, а компонента швидкості v - на горизонтальних межах різницевих осередків.

Різницева схема розщеплення, що має другий порядок точності за часом, для рівняння переносу завихреності має вигляд

$$\begin{aligned} & \left(E + \frac{\Delta t}{2} (L_x^+ + L_y^+) - \frac{\Delta t}{2 \text{Re}} (M_{xx}^+ + M_{yy}^+) \right) \omega^{n+1/2} = \\ & = \left(E - \frac{\Delta t}{2} (L_x^- + L_y^-) + \frac{\Delta t}{2 \text{Re}} (M_{xx}^- + M_{yy}^-) \right) \omega^n, \\ & \left(E + \frac{\Delta t}{2} (L_x^- + L_y^-) - \frac{\Delta t}{2 \text{Re}} (M_{xx}^- + M_{yy}^-) \right) \omega^{n+1} = \\ & = \left(E - \frac{\Delta t}{2} (L_x^+ + L_y^+) + \frac{\Delta t}{2 \text{Re}} (M_{xx}^+ + M_{yy}^+) \right) \omega^{n+1/2} \end{aligned} \quad (13)$$

Для розв'язування рівняння Пуассона застосовується метод встановлення розв'язку за фіктивним часом

$$\frac{\partial \psi}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \omega$$

Схема розщеплення для даного рівняння має вигляд

$$\psi^{l+1/4} = \psi^l + \bar{\omega} \frac{\Delta\eta}{2}$$

$$\left(E - \frac{\Delta\eta}{2} (M_{xx}^+ + M_{yy}^+) \right) \psi^{l+2/4} = \left(E + \frac{\Delta\eta}{2} (M_{xx}^- + M_{yy}^-) \right) \psi^{l+1/4} \quad (14)$$

$$\left(E - \frac{\Delta\eta}{2} (M_{xx}^- + M_{yy}^-) \right) \psi^{l+3/4} = \left(E + \frac{\Delta\eta}{2} (M_{xx}^+ + M_{yy}^+) \right) \psi^{l+2/4}$$

$$\psi^{l+1} = \psi^{l+3/4} + \bar{\omega} \frac{\Delta\eta}{2}$$

За розрахованими значеннями функції току ψ у вузлах різничевої сітки визначаються компоненти швидкості на вертикальних і горизонтальних гранях різницевих осередків. Гранична умова типу Неймана задовольняється в ході ітерацій за рахунок визначення завихреності у приграничних осередках. Знайдені значення компонент вектора швидкості води використовуються для розрахунку транспортування ЗР у водоймі. У п. 5.10 побудована неявна різницева схема розщеплення рівняння (12), що має вигляд:

$$\begin{aligned} & \left(E + \frac{\Delta t}{2} (L_x^+ + L_y^+) - \frac{\Delta t}{2 Pe} (M_{xx}^+ + M_{yy}^+) \right) \varphi^{n+1/2} = \\ & = \left(E - \frac{\Delta t}{2} (L_x^- + L_y^-) + \frac{\Delta t}{2 Pe} (M_{xx}^- + M_{yy}^-) \right) \varphi^n \quad (15) \\ & \left(E + \frac{\Delta t}{2} (L_x^- + L_y^-) - \frac{\Delta t}{2 Pe} (M_{xx}^- + M_{yy}^-) \right) \varphi^{n+1} = \\ & = \left(E - \frac{\Delta t}{2} (L_x^+ + L_y^+) + \frac{\Delta t}{2 Pe} (M_{xx}^+ + M_{yy}^+) \right) \varphi^{n+1/2} \end{aligned}$$

Чисельний алгоритм розрахунку гідродинаміки течії і переносу забруднень у водоймах реалізовано у вигляді КП "Водойма". Для моделювання гідродинаміки і транспорту ЗР у водоймах зі складною

геометрією берегів, при наявності приток (рис. 4,в), островів в розробленому алгоритмі використовуються маркери, які дозволяють виділити різниці осередки, що стосуються русла водойми, приток і суші.

Для розрахунку гідродинаміки течії та транспорту ЗР в руслах, що мають складну геометрію границь при великих числах Re , побудовано КП "Водойма-2", який допомагає реалізувати на ПЕОМ модель вихрової відривної течії невіязкої рідини (7) (п. 5.10.1)

У п. 5.11 проведено методичні дослідження розробленого чисельного алгоритму для розрахунку гідродинаміки течії у руслах. Методичне дослідження проведено на прикладі задачі про обтікання зворотнього уступу плоским потоком нестисливої в'язкої рідини, течії в порожнині прямокутного перерізу з верхньою рухомою границею та втікання струменя у прямокутну камеру. Результати розрахунку за розробленим алгоритмом порівнюються з широко відомими у літературі експериментальними даними і розрахунками інших авторів (рис. 1,6).

У п. 5.12-5.14 КП "Водойма", "Водойма-2" застосовувався для дослідження в різних фізичних постановках задач забруднення води у Водоймах.

У п. 5.12 наводяться результати розрахунку поширення ЗР у акваторії ріки при викиді забруднювачів з острова. Моделюється ступінь забруднення акваторії водойми у випадку зміни місця викиду ЗР на острові. Обраховувалась динаміка змін інтенсивності, розмірів і форми зони антропогенного забруднення води (рис. 4,5).

У п. 5.13 подано результати математичного моделювання гідродинаміки течії і поширення ЗР у водоймі при викиді домішки з

півострова у акваторію. Прогноз стану водойми і еволюції зони забруднення акваторії виконано для двох різних розмірів півострова і положень місця викиду забруднювачів з півострова.

У п. 5.14 представлено результати розрахунку гідродинаміки течії і транспорту ЗР у водоймі зі складною геометрією берегів, при наявності притоків. Зроблено прогноз розмірів, форми та інтенсивності зони забруднення основного русла водойми. Розглядалося розв'язання двох прогнозних задач. Перша задача моделювала ситуацію попадання у основне русло водойми забруднювачів з водою з притоки, причому ступінь забруднення води у притоці значно перевершує величину фоновго забруднення води у головному потоці. Постановка другої задачі моделювала ситуацію "розбавлення" забрудненої води у головному руслі водою з притоки. Результати розрахунків знайдено за допомогою КП "Водойма" та "Водойма-2" (рис. 3, 4, в).

Відомо, що на островах, розташованих у руслах рік, можуть знаходитись промислові підприємства, на території яких нерідко зберігаються усіяні віходи, сировина і таке інше. Під впливом атмосферних опадів і при відсутності на поверхні землі захисного екрану відбувається надходження забруднювачів у ґрунт, фільтрація їх і виніс у акваторію ріки. У п. 5.15 побудована математична модель і алгоритм розв'язування даної задачі, яка названа спряженою. Покладаємо, що забруднення у ґрунті острова поширюються за рахунок дифузії. На границі поділу (береговій лінії) забруднення з острова потрапляє в акваторію за рахунок дифузії, а у рідині перенесення забруднення відбувається двома фізичними процесами: дифузією і конвекцією. У п. 5.15 даються результати прогнозу розмірів, форми та інтенсивності зони забруднення акваторії для розглянутого механізму забруднення

водойми.

Відомо, що токсичні речовини, які накопичуються в заглибинах, впадинах на дні водойми спроможні визвати значне забруднення акваторії. У п. 5.16 розроблено постановку, алгоритм і подано результати розв'язування задачі про такий механізм забруднення акваторії водойми. В моделі допускається, що всередині виїмки процес поширення забруднювачів обумовлений дифузією, а на решті області течії - конвекцією і дифузією. Вихідним рівнянням для описання цього процесу поширення ЗР у водному середовищі є рівняння виду (1) без джерельних складових і величини ω . Для концентрації ЗР на дні виїмки ставляться граничні умови двох видів: $\varphi = \varphi_0$, де φ_0 - задане значення концентрації ЗР; чи $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = q_0$, де q_0 - відоме значення потоку ЗР. На основі розглянутої моделі створено КП "Виїмка". Числовий розв'язок задачі спільно з розглянутими крайовими умовами здійснюється за допомогою неявної ЗТС, побудованої у главі II. У п. 5.16 проведено параметричні дослідження впливу швидкості і напрямку водного потоку і розмірів виїмки на ступінь забруднення водного середовища.

В п. 5.17 розглянуто один з аспектів проблеми моделювання забруднення підземних вод: міграція ЗР у підземних водах від вододістийників. У комп'ютерній моделі розрахунку гідродинаміки течії і переносу ЗР у підземних водах використовуються усереднені по товщині водоносного шару h рівняння:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(kh \frac{\partial \bar{H}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(kh \frac{\partial \bar{H}}{\partial y} \right) = 0, \quad (16)$$

$$n \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \sigma \varphi = \operatorname{div}(\mu \nabla \varphi), \quad u = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial x}, v = -k \frac{\partial \bar{H}}{\partial y}, \quad (17)$$

де $\varphi(x, y) = \frac{1}{h} \int_{z_1}^{z_2} \varphi(x, y, z) dz$ - концентрація забруднювачів,

$\bar{H} = \frac{1}{h} \int_{z_1}^{z_2} H(x, y, z) dz$, - гідростатичний напір, z_1, z_2 - нижня та верхня

позначки водоносного шару.

В побудованому алгоритмі розрахунку гідродинаміки фільтраційної течії і транспорту ЗР у підземних водах, котрий реалізовано у КП "Водовідстійник", використовуються маркери, які дозволяють виділити різницеві осередки, що належать тій частині розрахункової області, де розташована ріка чи якась інша водойма, джерела ЗР і осередки, що відповідають області фільтраційної течії. Використання маркерів дозволило створити універсальний алгоритм розрахунку, що дає можливість чисельного моделювання для джерел забруднення і водойм, які мають довільну форму в плані і розташовані різним чином по відношенню один до одного в розрахунковій області.

Для розв'язування рівняння (16) застосовується ЗТС з використанням ідеї встановлення розв'язку за фіктивним часом:

$$\left(H_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - H_{ij}^n \right) = \left((M_{xx}^+ + M_{yy}^+) H_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + (M_{xx}^- + M_{yy}^-) H_{ij}^n \right) \cdot \frac{1}{2} \Delta t$$

$$\left(H_{ij}^{n+1} - H_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \right) = \left((M_{xx}^- + M_{yy}^-) H_{ij}^{n+1} + (M_{xx}^+ + M_{yy}^+) H_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \right) \cdot \frac{1}{2} \Delta t,$$

де $M_{xx}^+ H = -(kh)_{i-1/2, j} \left| H_{ij} - H_{i-1, j} \right| / \Delta x^2$,

$$M_{xx}^- H = + (kh)_{i+1/2,j} |H_{i+1,j} - H_{i,j}| / \Delta x^2$$

Для числового інтегрування рівняння (17) використовується ЗТС, побудована у главі II.

В п.5.17 КП "Водовідстійник" використано для розв'язування прогнозової задачі про забруднення підземних вод від одного і двох водовідстійників, розташованих поблизу водойми.

В шостій главі розроблені методи використано для розв'язування проблемних задач з природоохоронної тематики для Придніпровського регіону.

В п. 6.1 досліджено динаміку мінералізації ділянки р. Самара і підземних вод навколо двох відстійників шахтних вод на б. Косьмінна та б. Свідок ВО "Павлоградвугілля". Внаслідок проведеного розрахунку досліджено еволюцію, форму та розміри зони забруднення підземних вод в регіоні; визначено час, коли засолені підземні води досягнуть русла р. Самара і розпочнеться процес її мінералізації; одержано оцінку кількості домішки, яка потрапляє в р. Самара завдяки наявності поблизу водовідстійників.

В п. 6.2 розв'язано задачу про забруднення ділянки р. Самара при раптовому викиді шахтних вод з відстійника на б. Свідок. Досліджено динаміку руху забруднювача вздовж водотоку та зміну інтенсивності забруднення ріки з плином часу; визначено час, коли забруднена вода по руслу досягне найближчого населеного пункту - села Вербки. Одержані тут результати розрахунків використано в регіональному проектно-дослідницькому інституті "Дніпроводгосп" для розробки заходів щодо зниження техногенного навантаження від ВО "Павлоградвугілля" на природне середовище.

В п. 6.3 виконано розрахунок зміни рівня мінералізації р. Дніпро на ділянці впадіння в неї р. Самара при прогресуючому рівні засолення р. Самара. Одержано прогнозу оцінку форми, рівня та інтенсивності зони засолення р. Дніпро на проміжку водотоку біля м. Дніпропетровськ. Виявлено підзони з високим рівнем домішки, розташовані поблизу водозаборів Придніпровського району.

В п. 6.4 розв'язано задачі про поширення шкідливих викидів від п'яти відвалів шахт ВО "Павлоградвугілля". Шляхом обчислювального експерименту при різних напрямках вітру визначено підзони забруднення, виникнення яких обумовлено взаємодією викидів від відвалів; одержано прогнозу оцінку рівня забруднення атмосфери над екологічно значимими об'єктами: населеними пунктами, сільгоспугіддями, лісопарком та ін.

В п. 6.5 розв'язано задачу про забруднення повітряного середовища від відвалу шахти "Героїв космосу" (ВО "Павлоградвугілля") під дією метефакторів та з урахуванням рельєфу місцевості, а також геометричної форми відвалу. Одержано оцінку рівня забруднення повітряного середовища за різних метеосумов над с.-г. угіддями, садом та селом Вербки, що розташовані поблизу відвалу. Одержані результати та розроблені методи поширення ЗР у повітряному середовищі використовуються в практиці проектного інституту "Дніпрогіршахт" при аналізі антропогенного забруднення від відвалів та технологічних комплексів шахт Західного Донбасу.

В п. 6.6 представлено розв'язування задачі про поширення домішок в робочій зоні шприц-машини (дослідний завод НДІ великогабаритних шин). Методом обчислювального експерименту визначено ефективність роботи аспіраційної системи по видаленню ЗР у ва-

падку вибраної схеми розташування місцевих відсосів.

В п. 6.7 розв'язано задачу про поширення пилових викидів в робочій зоні дозаторів будівельних матеріалів (Дніпропетровських комбінат "Промбудматеріали"). Досліджено ефективність роботи аспіраційної мережі у випадку циклічного викиду ЗР і визначено необхідний час роботи відсосів для видалення ЗР з робочої зони.

В додатку приводяться документи про практичне використання результатів дисертаційної роботи.

Основні наукові результати.

Одержані в дисертаційній роботі результати спрямовані на розв'язання важливої наукової проблеми - розробки ефективних математичних методів прогнозування забруднення водного та повітряного середовищ при інтенсивних техногенних навантаженнях.

Основний підсумок роботи.

1. Розроблено комплексний підхід до математичного описання різноманітних фізичних процесів поширення забруднюючих речовин у водному та повітряному середовищах, який ґрунтується на базі дискретних балансових співвідношень для контрольного елемента. На базі розробленого підхода побудовано ефективні неявні різницеві алгоритми для розрахунку гідродинаміки та переносу ЗР у повітряному та водному середовищах, які відповідають сучасним напрямкам розвитку чисельних методів типу TVD. Алгоритми мають логічну простоту, економічні, зручні для програмування і вимагають невеликих витрат машинного часу при реалізації на ПЕОМ. Новий якісний рівень чисельного моделювання ґрунтується на розробці алгоритмів корекції потоків, які забезпечують підвищений порядок точності, мінімальні дифузійні похибки при збереженні монотонності розподілу

основних параметрів.

2. Розроблено нові ефективні комп'ютерні методи розрахунку гідроміграційних процесів у протічних водоймах:

- неявний метод, що ґрунтується на чисельному інтегруванні рівнянь Нав'є-Стокса (планова задача);

- неявний метод, заснований на чисельному інтегруванні рівнянь вихрових відривних течій невязкої рідини (планова задача);

- неявний і явний методи, що базуються на чисельному інтегруванні рівнянь річкової гідраліки.

Перші два методи дозволяють розрахувати гідродинаміку течії, концентрацію ЗР у водоймі, визначити форму і розміри зони техногенного забруднення води з урахуванням геометричної форми русла, наявності приток, водозаборів та островів зі складною геометричною формою, форми вогнища забруднення, типу і характеру викиду. Розроблені методи дозволили виконати комплекс досліджень, пов'язаний з визначенням впливу даних факторів на інтенсивність забруднення водойм. Методи розрахунку, що базуються на рівняннях річкової гідраліки, дають можливість розрахувати гідродинаміку та концентрацію ЗР у водотоках з урахуванням типу викиду, приток, регулювання стоку та ін. На базі даних методів досліджено динаміку забруднення р. Самари при скиді шахтових вод з відстійника на б. Свидовок.

3. Розроблено ефективний алгоритм розрахунку і розв'язано просторову задачу прогнозування забруднення акваторії водойми при поширенні шкідливих речовин з могильника відходів на дні водойми.

4. Розроблено метод розрахунку гідроміграційних процесів у підземних водах поблизу водовідстійників шахтних вод, що мають у

плані довільну форму, який було застосовано для розв'язування прогнозної задачі засолення підземних вод і р. Самари поблизу водовідстійників ВО "Павлоградвугілля".

5. Побудовано чисельну модель, алгоритм і розв'язано спряжену задачу техногенного забруднення водою при попаданні домішок у водоток з фільтраційними водами.

6. Розроблено ефективний комп'ютерний метод прогнозування якості повітряного середовища всередині робочих зон. Метод дає можливість визначити концентрацію ЗР в робочих зонах, потрібні об'єми повітря і режими роботи відсосів для забезпечення необхідних санітарно-гігієнічних норм; аналізувати на стадії проектування аспіраційної мережі ефективність її роботи для вибраної схеми розміщення місцевих відсосів. Метод було використано для розв'язання широкого кола задач про забруднення робочих зон на підприємствах шинної та хімічної промисловості.

7. Розроблено комплекс методів прогнозування якості атмосфери:

- побудовано ефективний комп'ютерний метод розрахунку гідродинаміки повітряного потоку та поширення ЗР в атмосфері з урахуванням рельєфу місцевості, забудови, форми джерел забруднення, типу викиду. Метод дозволяє також розв'язувати задачі про провітрювання виробничих приміщень та виробок;

- побудовано ефективні комп'ютерні методи розрахунку поширення ЗР в атмосфері в локальному масштабі, а також у випадку далекого переносу ЗР.

Розроблені методи прогнозування якості атмосфери було використано для розв'язування прикладних задач про забруднення повітря

від джерел гірничопромислового комплексу.

8. Розроблено спеціалізоване програмне забезпечення - КП "Акваторія", "Водойма", "Водойма-2", "Віямка", "Водовідстійник", "Прогноз-1", "Прогноз-2", "Прогноз-3", "Аспірація" для аналізу і прогнозу якості водного та повітряного середовищ.

9. Розв'язано ряд важливих прикладних задач про поширення ЗР у повітряному та водному середовищах, що проілюструвало ефективність та універсальність розроблених КП. Результати роботи впроваджено в практиці низки установ та вузів України.

Основні положення і результати дисертаційної роботи надруковані у 67 роботах, у тому числі

1. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Численный расчет распространения аэрозольных загрязнений. Учебное пособие. Днепропетровск: ДГУ, 1990. - 80с.

2. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Расчет принудительной вентиляции карьеров от вредных примесей // Математические методы теплопереноса. - Днепропетровск: ДГУ, 1985. - С. 60-63.

3. Беляев Н.Н. Численный расчет распространения аэрозоля от нескольких источников загрязнения // Численные решения задач механики жидкости и газа. Днепропетровск: ДГУ, 1988. - С. 73-80.

4. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Численное решение распространения аэрозоля при точечном выбросе // Гидроаэромеханика и теория упругости. - Днепропетровск: ДГУ, 1988. - С. 11-15.

5. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Расчет распространения выброса аэрозоля в атмосфере // Математическое моделирование процессов теплопереноса. - Днепропетровск: ДГУ, 1988. - С. 120-123.

6. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Численное моделирование удаления примесей из рабочей зоны технологического оборудования // Расчет течений жидкости и газа. Днепропетровск: ДГУ, 1989. - С. 145-163.

7. Беляев Н.Н. Расчет переноса спор растений в атмосфере // Гидроаэромеханика и теория упругости. - Днепропетровск: ДГУ, 1989. - С.15-18.

8. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Расчет вентиляции помещения от вредных примесей // Гидроаэромеханика и теория упругости. - Днепропетровск: ДГУ, 1990. - С. 23-26.

9. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Численное моделирование вентиляции помещения от аэрозольных загрязнителей. // Моделирование и методы расчета процессов теплопереноса. - Днепропетровск: ДГУ, 1990. - С. 155-163

10. Беляев Н.Н. Расчет сноса химикатов ветром при опрыскивании растений // Численно-аналитическое исследование процессов теплообмена. - Днепропетровск: ДГУ, 1990. - С. 41-45.

11. Беляев Н.Н. Расчет процесса распространения примеси в помещении // Численные методы и математическое моделирование теплопереноса. - Днепропетровск: ДГУ, 1991. - С. 142-148.

12. Беляев Н.Н., Побединская Л.В. К расчету распространения аэрозольных примесей от движущегося источника // Численные методы и математическое моделирование теплопереноса. - Днепропетровск: ДГУ, 1991. - С. 95-101.

13. Беляев Н.Н., Побединская Л.В. К расчету распространения примеси в помещении от движущегося источника-загрязнителя // Математическое моделирование в механике жидкости и газа. - Днепропетровск: ДГУ, 1992. - С. 103-108.

14. Беляев Н.Н. Математическое моделирование процессов распространения ядохимикатов при обработке сельскохозяйственных объектов и его компьютерная реализация // Вестник Днепропетровского университета. Биология и экология. - Днепропетровск, ДДУ, 1993. - С. 28.

15. Беляев Н.Н. Компьютерное моделирование распространения вредных веществ в рабочих зонах технологических агрегатов // Изв. вузов и высших энергетических объединений СНГ. Сер. Энергетика, 1994. - № 5-6. - С. 70-75.

16. Антонова В.А., Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Моделирование уноса загрязнений с углублений на дне водосема // Изв. вузов и высших энергетических объединений СНГ. Сер. Энергетика, 1994. - № 7-8. - С. 104-107.

17. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Математическая модель нестационарного пространственного переноса загрязнений в атмосфере // Изв. вузов и высших энергетических объединений СНГ. Сер. Энергетика, 1994. - № 1-2. - С. 134-141.

18. Беляев Н.Н. и др. Прогнозирование экологического ущерба при ведении боевых действий неядерными средствами. // Космическая техника. Ракетное вооружение. Научно-технический сборник, вып. 3. - Днепропетровск, 1994. - С. 37-49.

19. Беляев Н.Н. и др. Математическое моделирование гидродинамики течений и переноса загрязнений в водном бассейне

Днепра // Космическая техника. Ракетное вооружение. Научно-технический сборник, вып. 3. - Днепропетровск, 1994. - С. 50-58.

20. Беляев Н.Н., Малевич Ю.А., Хрущ В.К. Численное моделирование гидродинамики течения и переноса загрязняющих веществ в мелких водоемах. // Изв. вузов и высших энергетических объединений СНГ. Сер. Энергетика, 1994. - № 11-12. - С. 81-85.

21. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Численное моделирование удаления примеси местными отсосами // Гидромеханика. Киев: Наукова думка, 1994. - Вып. 68. - С. 26-30.

22. Беляев Н.Н., Малевич Ю.А., Хрущ В.К. Моделирование загрязнения подземных вод в окрестности водоотстойника. // Изв. вузов и высших энергетических объединений СНГ. Сер. Энергетика, 1995. - № 1-2. - С. 82-85.

23. Беляев М.М. та ін. Комп'ютерне моделювання транспорту забруднюючих речовин в акваторії рік // Хімічна промисловість України. - Київ. - . - 1995. - № 1. - С. 40-42.

24. Беляев Н.Н. и др. Компьютерные методы прогноза качества поверхностных и подземных вод // Хімічна промисловість України. - Київ. - . - 1995. - № 3. - С. 77-80.

25. Беляев Н.Н. Компьютерно-вычислительные системы прогноза загрязнения воздуха в промышленных регионах Украины. // Биологические и технические системы регулирования. - Днепропетровск: ДГУ. - 1995. - С. 6-9.

26. Беляев Н.Н., Хрущ В.К. Компьютерное моделирование рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере, водоемах и подземных водах. // Сучасні технології у важкому та транспортному машинобудуванні. Відділення важкого та транспортного машинобудування Академії інженерних наук України. - Дніпропетровськ. - 1995. - С. 95-104.

27. Беляев Н.Н. и др. Прогноз качества атмосферы при аварийных выбросах // Новые разработки в машиностроительном производстве. - Академия инженерных наук Украины. - Днепропетровск, 1996. - С. 84-88.

28. Беляев Н.Н. и др. Математическое моделирование загрязнения приземного слоя от отвалов // Новые разработки в машиностроительном производстве. - Академия инженерных наук Украины. - Днепропетровск, 1996. - С. 81-83.

29. Belyaev N.N. et al. The mathematical simulation of the pollution of the ground waters. // International Congress "Water: Ecology and Technology". Moscow, September 6-9, 1994. - Vol. 1. - P. 90.

30. Belyaev N.N. et al. The prediction of the River Dniepr pollution by the method of the mathematical modelling. // (see in previous book). - P. 91.

31. Belyaev N.N. et al. The use of the space investigations and the results of the mathematical modelling for creation of the computer system for transboundary pollutant transfer calculation. // IAC'94 International Aerospace Congress. Theory, Applications, Technologies. August 15-19, 1994. Moscow, Russia. - P. 79.

32. Pobedinskaya L.V., Belyaev N.N. The application of the computer experiment for the calculation of the pollutant dispersion in the industrial areas of the tire plants. // IRC'94, Environment Protection. - Volume 3. - Moscow. - 1994. - P. 652-654.

33. Belyaev N.N., Khrutsch V.K. The joint use of the space probe results and the results of the computer modelling for creation the computer system for calculation of long-range pollutant transfer. // AIAA Paper, 1994. - № IAA-94-IAA.33.650. - Washington, USA. - 3P.

34. Belyaev N.N., Khrutsch V.K. Numerical modelling of the flows and conjugate heat transfer under microgravitation in closed areas. // AIAA Paper, 1994. - № IAF-94-J.5.260. - Washington, USA. - 4P.

35. Belyaev N.N., Khrutsch V.K. Numerical modelling of the hydrodynamics of flows in the case of the regulation of the run off in river beds. // ICFM5/95, Proc. 5th Int. Conf. Fluid Mechanics, Cairo, Egypt, 2-5 Jan. 1995. - Cairo, Cairo University Publication. - 1995. - Vol. 1. - P.339-347.

36. Belyaev N.N., Khrutsch V.K. Implicit monotonic difference schemes of splitting of the second order of accuracy of solving the Euler and Navier-Stokes equation // ICFM5/95, Proc. 5th Int. Conf. Fluid Mechanics, Cairo, Egypt, 2-5 Jan. 1995. - Cairo, Cairo University Publication. - 1995. - Vol. 1. - P. 369-377.

37. Belyaev N.N., Khrutsch V.K. Computer system for analysis and prediction of air pollution in plant shops. // Доповіді НАН України. - Київ. - 1995. - № 2. - С. 130-131.

Belyaev N.N. Mathematical simulation of the pollutant transfer in the aqueous medium and atmosphere. The manuscript is represented for the Doctoral Degree in the specialty 05.13.02 - mathematical simulation in science investigations. Taras Shevchenko Kiev University, Kiev, 1996. 67 scientific publications are defended which consist of the unity of theoretical investigations on the mathematical simulation of the pollution processes

in water bodies, ground waters, atmosphere, air of the industrial rooms. The new difference schemes to calculate both the hydrodynamics of flows in water bodies and pollutant transfer in the atmosphere, water bodies, ground waters were developed. The software capable of predicting pollution transfer under varying factors was developed. The wide range of the problems of the environment protection solved with the software developed is presented.

Беляев Н.Н. Математическое моделирование распространения загрязняющих веществ в водной и воздушной средах. Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 05.13.02. - математическое моделирование в научных исследованиях. Киевский университет имени Тараса Шевченко, Киев, 1996. Защищается 67 научных работ, в которых содержится совокупность теоретических исследований по математическому моделированию процессов загрязнения проточных водоемов, подземных вод, атмосферы и воздушной среды в производственных помещениях. Построены новые разностные алгоритмы для расчета гидродинамики течений и переноса загрязняющих веществ в водной и воздушной средах, на основе которых создано специализированное программное обеспечение. Приводятся результаты решения широкого круга прикладных задач.

Ключові слова: математичне моделювання, чисельні методи, якість атмосфери, повітря у виробничих приміщеннях, поверхневих, підземних вод, неявні алгоритми, антидифузійний крок.

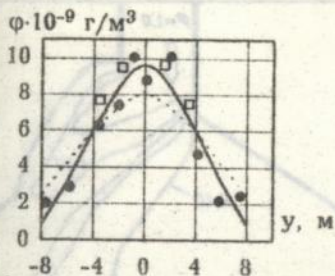


Рис. 1,а. Розподіл концентрації ЗР:
 - - розрахунок за схемою 1-го порядку точності; — - розрахунок з використанням антидифузійного кроку; □ - аналітичний розв'язок; ● - експеримент (Р.В.Озмідов).

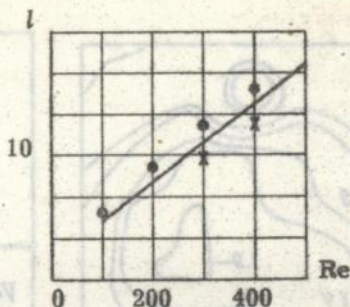


Рис. 1,б. Залежність від числа Re величини області зворотної течії за уступом: — - розрахунок за розробленим алгоритмом; X - розрахунок (І.О.Белов та ін.); o - експеримент (В.А.Гуля)

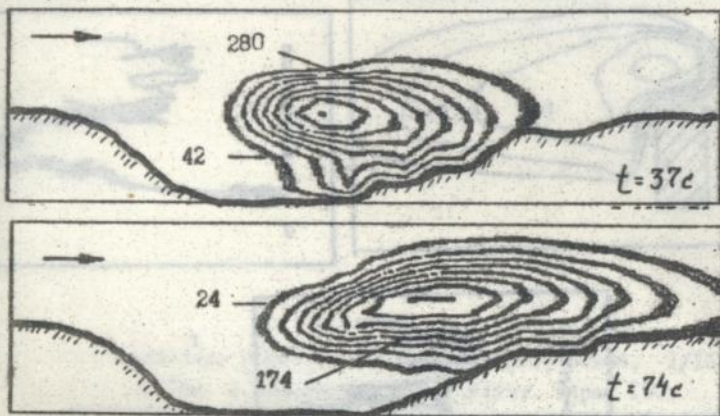


Рис. 2. Розподіл концентрації ЗР після вибуху в кар'єрі.

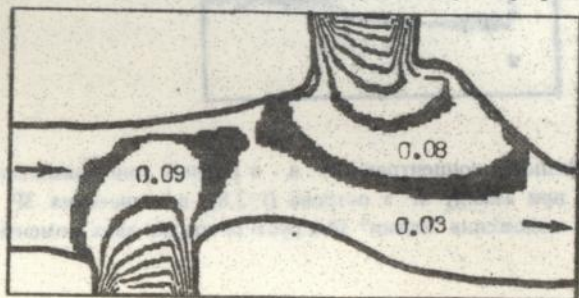


Рис. 3. Розподіл концентрації ЗР при внесенні домішки з двома притоками.

438319

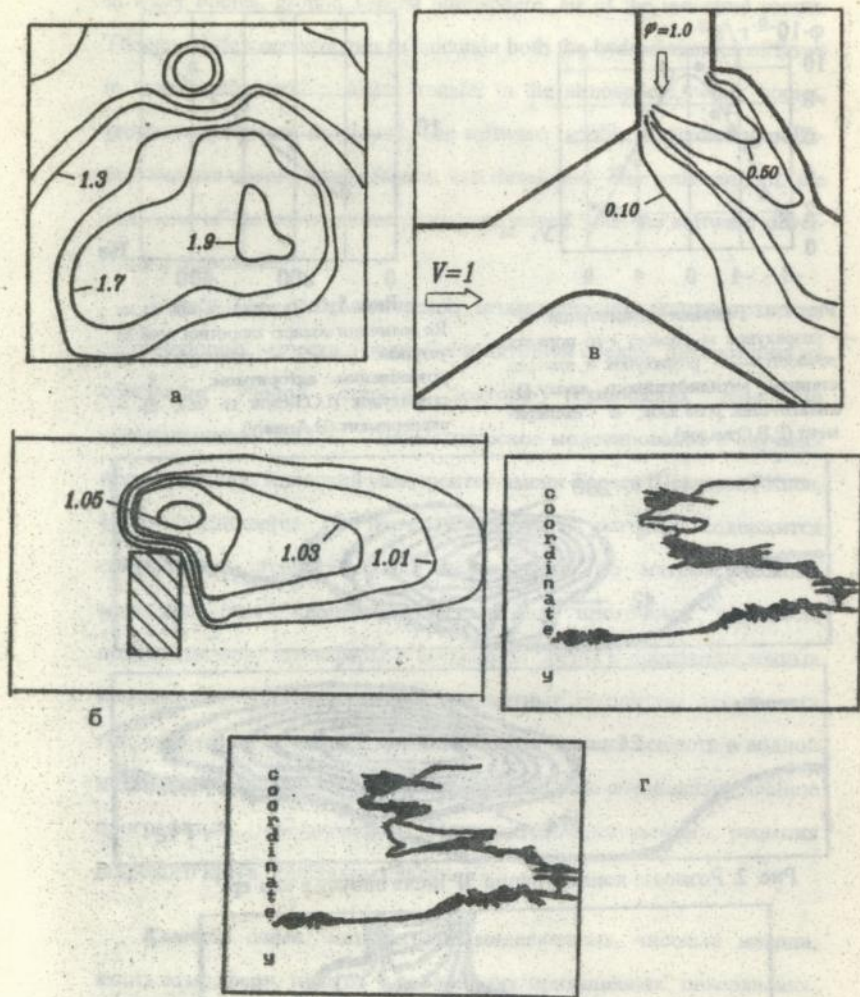


Рис. 4. Розподіл концентрації ЗР: а - в робочій зоні приміщень ($t=0,40$); б - при викиду ЗР з острова ($t=2,8$); в - внесення ЗР з притокою; г - положення "плями" ЗР в руслі річки для двох моментів часу.

Подписано к печати 19.09.96. Формат 60x84, 1/16
Объем 2 печ. лист. Заказ №1941. Тираж 100.

Типография ДГУ

438919

AB 35.603