

DOI: 10.32347/2076-815x.2022.79.381-395

УДК 712.4

д.т.н., професор Татарченко Г.О.,
tatchenkogalina@gmail.com, ORCID: 0000-0003-4685-0337,
Східноукраїнський національний університет імені Володимира Даля

ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗСІЮВАННЯ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В АТМОСФЕРІ

Проведено аналіз методів та моделей стану навколишнього середовища та встановлено, що за рахунок багатогранності та багатоаспектності підходів при побудові єдиної класифікації атмосферних моделей є складним завданням. Визначено, що модель Лагранжа обчислює дисперсію забруднення повітря шляхом розрахунку безперервної траєкторії шлейфу, і цей метод можна використовувати для розрахунку профілів розсіювання озону на прилеглий території від точкового джерела. Для визначення рівня чистоти використовувати нечітку логіку, тоді поняття "рівень чистоти" стане лінгвістичною змінною. Гаусова модель дозволяє розраховувати концентрації забруднюючих речовин у галузі моделювання по прямій лінії між джерелом та точкою розрахунку для кожної години та отримати модель забруднення викидами при магістральній території міста. Статистичні моделі є корисним інструментом діагностики та передбачення якості повітря через інтерполяцію та екстраполяцію вимірних даних. Елементи моделей міських каньйонів плануємо використовувати для прогнозу концентрацій викидів на автомагістралях на коротких часових інтервалах (від кількох годин до доби). Реакція $NO-NO_2-O_3$ потребує дуже високих концентрацій оксиду азоту та тривалого часу знаходження газів, щоб надавати значний вплив. Це може бути при застійних погодних умовах, коли значні концентрації полутантів спостерігаються кілька днів. Але моделей, які задовільно описують це явище, поки що немає.

Ключові слова: моделювання; розсіювання; забруднюючі речовини; атмосфера; місто; урбанізація.

Постановка проблеми. Однією з основних проблем глобальної урбанізації є забруднення повітря. У теперішній час існує понад 150 моделей розсіювання, розроблених у Європейському агентстві з охорони навколишнього середовища Європейського центру з атмосферного повітря та зміни клімату.

Атмосферною моделлю загалом можна назвати будь-яку математичну процедуру, результатами якої є оцінка якості навколишньої атмосфери.

Розвиток атмосферних моделей здійснюється головним чином за двома напрямками:

- розробка теорії атмосферної дифузії, де моделі ґрунтуються на описі фізичних та хімічних процесів таких як розрахунок викидів, атмосферної адвекції та розсіювання, хімічної трансформації та осадження;
- емпірико-статистичний аналіз поширення забруднюючих речовин в атмосфері з використанням переважно Гаусівських інтерполяційних моделей.

Для опису забруднення атмосфери міст викидами від автотранспорту виділяють такі основні класи атмосферних моделей: аналітичне рішення рівняння турбулентної дифузії; чисельне моделювання турбулентних течій; Лагранжеві; Гаусові; міських каньйонів; статистичні.

Для отримання достовірної інформації про стан атмосферного повітря примігстральних територій міста використовуються різні методи аналізу та моделювання стану довкілля.

Метою публікації є аналіз теоретичних аспектів моделювання розсіювання забруднюючих речовин в атмосфері для управління якістю повітря у містах.

Аналіз попередніх досліджень і публікацій. Основна частина. Аналітичне рішення рівняння турбулентної дифузії. Основним завданням цього методу є розрахунок максимальних значень концентрацій, отримання функціональних залежностей концентрацій від основних чинних факторів.

Багато моделей, що моделюють розповсюдження забруднення повітря, засновані на рішенні (чисельному чи аналітичному) рівняння адвекції-дифузії, що передбачає параметризацію турбулентності для реалістичних фізичних сценаріїв. Загальне стаціонарне тривимірне рішення рівняння адвекції-дифузії з урахуванням вертикально неоднорідного прикордонного шару атмосфери для довільних вертикальних профілів вітру авторами [1]. Отримано [2] вираз для рівняння адвекції-дифузії, що залежить від вихрової дифузії, асиметрії, Лагранжевої шкали часу і вертикальної турбулентної швидкості. Єдине аналітичне рішення рівняння стаціонарної атмосферної дифузії для кінцевих і напівнескінченних середовищ - це технічний метод поділу змінних.

Діяльність [3] рівняння адвекції-дифузії вирішується у двох вимірах до розрахунку нормованої інтегрованої концентрації бічного вітру методом Лапласа. Враховуючи, що швидкість вітру стала, є дві моделі коефіцієнта дифузії вертикальних вихорів: одна залежить від відстані за вітром, а інша модель залежить від відстані по вертикалі. Що стосується нормалізованої середньоквадратичної похибки (NMSE) і дробової частини Bais (FB), друга модель краще працює з даними, що спостерігаються, ніж прогнозована перша модель в нестабільних умовах.

Рішення у роботі [4] отримано з урахуванням довільної середньої швидкості вітру, яка залежить від вертикальної координати (z), і узагальненої функціональної форми, що розділяється, для коефіцієнтів дифузії вихорів через поздовжні (x) і вертикальні координати (z). Описані приклади показують, що відомі аналітичні рішення в замкнутій формі, доступні в літературі як для кінцевих, так і для напівнескінчених/нескінчених середовищ, є окремими випадками цього уніфікованого аналітичного рішення. Вони добре узгоджуються з рішеннями, отриманими з інших аналітичних процедур.

У роботі [5] надано оцінку ефективності єдиного формального аналітичного рішення для моделювання завдань атмосферної дифузії в стабільних умовах. Ефективність формального аналітичного рішення оцінюється шляхом порівняння збіжних прогнозованих результатів зі спостережуваними значеннями стабільних прогонів експерименту Prairie Grass, а також з результатами моделювання, доступними в літературі. Розроблений алгоритм є ефективним і швидкість збіжності залежить від умови стійкості та розглянутих параметрів швидкості вітру та турбулентності.

Чисельне моделювання турбулентних течій. Це потужний інструмент для дослідження турбулентних потоків як для теоретичних досліджень, так і для практичних програм. Надійність моделювання в основному залежить від прийнятої моделі турбулентності і підвищення її точності є критично важливим питанням. [6]. Дана модель дозволяє вивчати чутливість клімату, прогноз погоди, забруднення природних середовищ та розробку систем моніторингу, забезпечення екологічної безпеки. Вона використовує багато методів вирішення, а саме: пряме чисельне рішення повної нестационарної системи рівнянь Нав'є-Стокса; розв'язання середніх рівнянь Нав'є-Стокса; враховується дрібномасштабна турбулентність за допомогою напівемпіричних співвідношень; розв'язання середніх рівнянь Нав'є-Стокса, додатково рівняння для кінетичної енергії турбулентності; моделювання крупних вихорів, де дрібномасштабний спектр виключається з вихідних рівнянь Нав'є-Стокса і параметризується на основі градієнтно-дифузійного замикання, а більша частина рухів розраховується з рішення фільтрованої нестационарної системи рівнянь; негідростатичне моделювання, де технологія вкладених розрахунків, параметризація підстилаючої поверхні, розрахована на багатопроцесорну техніку.

Автори [7] досліджували можливість альтернативного формулювання рівнянь Нав'є-Стокса, заснованої на стохастичному представленні поля швидкості. Новий підхід, названий псевдостохастичним моделюванням (PSS), є узагальненням широко розповсюдженої класичної моделі вихрової в'язкості, в якій внесок невіршених масштабів руху виражається тензором дисперсії, що

моделюється відповідно до різних парадигм. Математично і чисельно порівнюються моделі PSS із класичними в турбулентному потоці.

У роботі [8] представлені підходи до моделювання турбулентності: усереднене за Рейнольдсом, Нав'є-Стокса (RANS), дворідинні моделі, моделювання дуже крупних вихорів. (VLES), нестационарне усереднене за Рейнольдсом, Нав'є-Стокса (URANS), моделювання окремих вихорів (DES) та деякі цікаві, відносно недавні, гібридні методи LES/RANS.

Рішення у крупному масштабі для детального моделювання крапель води, розсіяних у турбулентному повітряному потоці ґрунтується на синтетичній моделі, побудованій з використанням попередньо обчислених автономних симуляцій RVE та цифрового дерева, що чергується, щоб охарактеризувати нелінійний динамічний відгук у дрібному масштабі. Мультимасштабна процедура поєднує новий елемент репрезентативного обсягу (RVE) з методом псевдопрямого чисельного моделювання (P-DNS). Розроблена синтетична модель використовується для моделювання потоків з повітряними краплями в глобальному масштабі за допомогою методу P-DNS. В результаті отримано покращені прогнози для умов потоку, в якому помітна модуляція турбулентності [9].

Лагранжеві моделі. Це потужний спосіб аналізу результатів моделей циркуляції, визначення траєкторій руху домішок та випадання осадів та інших даних про швидкості.

Модель Лагранжа обчислює дисперсію забруднення повітря шляхом розрахунку безперервної траєкторії шлейфу, як рядів дискретних парцел забруднювачів. Дана модель використовує рухому систему відгуку відносно свого початкового розташування. Загальна концентрація забруднювача у точці обчислюється з урахуванням вкладу всіх складових шлейфів. Шарова модель також може включати розподілу Гауса для опису розсіювання забруднюючих речовин в кожному шлейфі. Цей підхід має більш високу ступінь точності, порівняно з Гаусовими дисперсійними моделями, проте потребує більшого часу для реалізації моделі.

Оцінка ефективності Лагранжевих моделей турбулентної дисперсії частинок, заснованих на рівнянні Ланжевена розглянуто в роботі авторів [10], де сімейство моделей Ланжевена, розкладає флуктуючу швидкість рідини, що спостерігається частково, на два компоненти, один з яких корелює з попереднім тимчасовим кроком, а другий вибирається із вінеровського процесу. Такі моделі можна вважати стандартними. Модель, запропонована Мін'є та Пейрано (2001 р.), заснована на функції щільності ймовірності та виконує замикання на рівні прискорення рідини, видимою частинкою. Формулювання моделі рівняння Ланжевена для збільшення швидкості рідини дозволяє вловити

деякі лежачі в основі фізики дисперсії частинок у загальних турбулентних потоках, зберігаючи при цьому простоту математичних маніпуляцій зі стохастичною моделлю, уникаючи деяких пасток.

Авторами [11] використовувалися модель на основі дисперсії лагранжевого потоку, тобто моделі A2Cflow/A2Ct&d і модель на основі стійкої Гаусової дисперсії шлейфу, тобто AERMOD. Результати моделювання AERMOD показали, що забруднюючі речовини від джерела переносяться і розсіюються навколо джерел аналогічно до середнього напрямку вітрового потоку. Порівняльний аналіз осадження забруднюючих речовин, оцінений за допомогою моделі стаціонарного Гаусового шлейфу і моделі Лагранжевого шлейфу, показав, що модель Гаусового шлейфу недооцінює величину розсіювання забруднення на береговому майданчику в денний час і завищує оцінку в період з пізньої ночі. Модель, заснована на Лагранжевих рівняннях, рекомендується для оцінки розсіювання та осадження забруднюючих речовин навколо області нестационарного повітряного потоку.

Для виміру антропогенних викидів вуглекислого газу (CO_2) на місці в умовах обмеження границями міста, автори [12] також використовують Лагранжеву методологію, засновану на реконструкціях за допомогою дифузійних зворотних траєкторій та байєсівської інверсії. Комплексну мережу спостережень за газами TRACE здійснюють за допомогою рейсів AirLiner (CONTRAIL), високої вежі Цукуба Метеорологічного науково-дослідного інституту (MRI) Японського метеорологічного агентства та двох наземних об'єктів - сайти (Додайра та Кісай) із Всесвітнього центру даних з парникових газів (WDCGG).

Гаусові моделі. Ці моделі є найпоширенішим у моделюванні аналізу повітряної дисперсії [13, 14]. Вони дозволяють розраховувати концентрації забруднюючих речовин в області моделювання по прямій лінії між джерелом та точкою розрахунку для кожної години. Однак вони не враховують час, необхідний для проходження шлейфу забруднювача від джерела до точки розрахунку. Так, при досить малих швидкостях вітру максимальна відстань, для якої можна створити розрахунки, не перевищуватиме 10 км. З цієї причини моделі Гауса обмежуються лише даною відстанню для прогнозування концентрацій забруднюючих речовин.

Сутність гіпотези про Гаусову модель шлейфу передбачає, що концентрація забруднювача в струмені пропорційна інтенсивності викиду і обернено пропорційна швидкості вітру в точці викиду. При швидкості вітру близької до нуля, передбачувана концентрація прагне нескінченності, і Гаусове представлення шлейфу є недійсним.

У групі моделей HIWAY-2 [15], CALINE-4 (California line source model) [16], 3M [17], GFLSM [18], OMG [19] для оцінки процесів розсіювання також застосовуються різні версії Гаусових моделей. У моделях HIWAY-2 та CALINE-4 концентрації при довільному напрямку вітру визначаються за допомогою численних процедур. Магістраль поділяють на послідовність елементів, концентрації яких обчислюються, та потім смутуються. Моделі ROADWAY [20] та MGO [21] засновані на підході, який використовує К-теорію, що дозволяє описувати взаємодію між процесами дифузії та хімічної трансформації. Моделі цієї групи завдяки розвитку комп'ютерних технологій роблять їх використання зручнішим.

G. Csanady [22] отримав аналітичне рішення Гаусового рівняння для кінцевого лінійного джерела в окремому випадку, коли вітер спрямований перпендикулярно дорозі. У моделі GFLSM (General Finite Line Source Model) таке рішення було ухвалено для будь-яких напрямків вітру щодо дороги. Аналітичне рішення моделі GFLSM спочатку було виведено з формули Гауса подібно до того, як, наприклад, у моделях HIWAY-2 і CALINE 4, у припущенні про необмеженість висоти кулі перемішування.

Рівняння розсіювання в моделі CAR-FMI ґрунтуються на Гаусовій моделі для лінійного обмеженого джерела. Параметри розсіювання, одержувані за допомогою цієї моделі, певною мірою відрізняються від параметрів моделі GFLSM, в якій застосовується параметризація на основі класів стійкості Песквілла. Параметри розсіювання у моделі CAR-FMI описуються функціями від довжини Моніна-Обухова, яка визначається відношенням швидкості вітру до висоти шару перемішування. Ці величини обчислюються за допомогою моделі метеорологічного препроцесора FMI [23]

Моделі міських каньйонів. Ці моделі найчастіше використовують для прогнозу концентрацій викидів на автомагістралях на коротких часових інтервалах (від кількох годин до доби).

Деякі найнебезпечніші випадки забруднення повітря викидами автотранспорту можуть спостерігатися на міських автомагістралях, оточених високими будинками. Такі конфігурації прийнято називати міськими каньйонами. Розсіювання повітря у міських каньйонах відрізняється від розсіювання на відкритих однорідних чи складних неоднорідних територіях. Інтенсивність вертикальної та горизонтальної турбулентності, наприклад, описується за подібними значеннями параметрів для міських каньйонів набагато меншими, ніж значення для відкритої однорідної території [24]. Масштаб турбулентності, що впливає на флуктуації концентрацій, обмежується в міських каньйонах.

Серед найбільш широко використовуваних моделей розсіювання у міських каньйонах - STREET [25], CPBM [26], CAR [27], OSPM [28]. Transport Research Board використали змішаний підхід CAL3Q, заснований на теорії масового обслуговування та теорії сигналів. G. Schattanek допрацював модель CAL3Q до моди CAL3QHC, що задовільно описує сценарії з низькою і високою щільністю автомобілів на міських автомагістралях [29].

Інший масштаб складності спостерігається в моделях, заснованих на чисельному розв'язанні рівнянь вітрового потоку та скалярної дисперсії. Ключова проблема тут полягає в тому, щоб отримати відповідну параметризацію коефіцієнтів вихрової (турбулентної) в'язкості та турбулентної дифузії. Ця проблема спільна для всіх турбулентних потоків, але в умовах міських каньйонів використовуються специфічні крайові та початкові умови. Застосування CPBM моделі дає значно кращі результати порівняно з емпіричною STREET-моделлю, особливо в широкому діапазоні метеорологічних ситуацій, які в STREET-модель не включені.

Емпіричний підхід був використаний у нідерландській моделі забруднення від автотранспорту CAR (Calculation of Air pollution from Road traffic) [27]. Підхід, подібний до Canyon Plum-Box моделі, був застосований у датській моделі OSPM (operational street pollution model) – оперативна модель забруднення вулиць. OSPM використовує спрощену параметризацію потоку та умов розсіювання у міських каньйонах. Ця параметризація була отримана шляхом експерименту ментальних даних та результатів тестування моделі [30]. Результати цих тестів були використані для покращення результатів моделі, особливо для різних конфігурацій вулиць та мінливих метеорологічних умов.

Порівняння традиційної моделі каньйону та двох модифікованих моделей каньйону, в яких враховується наявність висотних будівель, представлено як для випадку вузькосмугового, так і широкосмугового сигналу. Вузька смуга створюється за допомогою трасування променів і включає пряму хвилю, дзеркальне відбиття від стін та землі будівель та дифраговані хвилі. Широкасмугова модель розроблена шляхом застосування передавальної функції каналу до даних, отриманих методом RT [31]. Пропоновані моделі використовуються для прогнозування сигналу, що приймається в реальних міських умовах з супутників.

Особливий інтерес викликають реакції окиснення, що призводять до трансформацій NO-NO₂. У більшості випадків ці процеси можуть бути успішно описані простою системою NO-NO₂-O₃, беручи до уваги час перебування газів в атмосфері вулиці [32]. В окремих випадках важливе значення можуть мати й інші хімічні механізми. Bower [33] та Derwent [34] відзначали епізоди забруднення в Лондоні в грудні, коли концентрації NO₂ досягають рівнів, які не

можуть бути пояснені лише озоновим окисненням. Можливий механізм реакції – це окиснення молекулярним киснем [35]. Так як це реакція третього порядку, вона вимагає дуже високих концентрацій оксиду азоту та тривалого часу перебування газів, щоб надавати значний вплив. *Це може мати місце при застійних погодних умовах, коли значні концентрації полутантів спостерігаються кілька днів. Але моделей, що задовільно описують це явище, поки немає.*

Статистичні моделі. Є корисним інструментом діагностики та передбачення якості повітря через інтерполяцію та екстраполяцію вимірних даних. Закономірності, що описуються за допомогою таких моделей, порівняно прості, що пояснює досить широке використання робіт цього напрямку у різних країнах.

Розробка методів прогнозу починається, насамперед, із виявлення періодів із значним забрудненням атмосфери. Потім встановлюються кореляційні залежності між тими, що спостерігалися в ці періоди забруднення повітря та деякими метеорологічними величинами або їх певним поєднанням, що розглядаються як предиктори. Таким шляхом виробляються різноманітні прогностичні правила. Використовуються також методи статистичної екстраполяції в часі режиму зміни забруднення повітря з урахуванням виявлених автокореляційних залежностей та інерційних факторів. Вибір предикторів зазвичай здійснюється із загальних фізичних представлень про можливі причини змін концентрацій домішки – зміни напрямку або швидкості вітру, стійкості атмосфери, вимивання або трансформації домішок.

Проведені дослідження показують, що статистичні моделі, засновані, наприклад, на аналізі числових рядів, мають значні обмеження для застосування в задачах моделювання забруднення повітря у випадках, коли основним джерелом є викиди автотранспорту. Достоїнством цих схем є розробленість формального апарату, відносна простота реалізації, можливість ефективності використання у рамках систем автоматизованого контролю забруднення атмосфери та достатньо висока виправданість [36]. W. Glem розробив емпіричну модель оцінки середньомісячних концентрацій CO для довгострокового тренду [37].

Прогнозування якості повітря (AQ) сприймається як проблема регресії за допомогою методів обчислювального інтелекту (CI). Моделі лінійної регресії, а також моделі штучної нейронної мережі розробляються разом з моделями Random forest для п'яти розташувань на досліджувану область і для набору даних з обмеженою розмірністю ознак [38].

Ансамблевий підхід також використовується для створення та тестування моделей прогнозування якості повітря. Результати [38] вказують на хорошу

продуктивність моделі з коефіцієнтом кореляції між прогнозами та вимірюваннями середньодобового значення концентрації за день до досягнення 0,765 для одного з положень. Загальні результати показують, що конкретний підхід до моделювання може підтримувати надання прогнозів якості повітря з урахуванням обмеженої розмірності простору ознак і з використанням простих моделей лінійної регресії.

А. Comrie та F. Diem розробили багатовимірні регресійні моделі для тимчасових рядів концентрацій CO [39]. Було виявлено, що ці моделі забезпечують хорошу точність добових прогнозів концентрацій CO з дисперсією від 0 до 9 ppm та помилками в межах 1 ppm. P. Sharma використовував теорію екстремальних значень для прогнозу кількості національних порушень стандартів якості атмосферного повітря (NAAQs) на перетині міських автомагістралей, де основним джерелом забруднення є викиди від автотранспорту [40]. Для таких же перехресть P. Sharma і M. KJiare використовували методи Бокса-Дженкінса для аналізу часових рядів з метою дослідження законів про контроль за викидами від автотранспорту та поліпшення короткострокових прогнозів рівнів забруднення навколишнього середовища автотранспортом у режимі реального часу [41].

Останнім часом статистичні методи, такі як штучні нейронні мережі, теорія нечітких множин, використовуються як альтернативний інструмент у моделюванні забруднення атмосферного повітря автомобільними вихлопами. Так, F. Raimondi розробив модель АРМ, засновану на теорії нечітких множин, що дозволяє моделювати невизначеності та описувати середньодобову динаміку дозових навантажень територій. Можливість використання теорії нечітких множин у задачах забруднення повітря показали в [42].

Непараметричний підхід до вивчення статистичної моделі, яка виявляє цікаву періодичну динаміку та кореляцію набору даних. В основі масштабованої структури оновлення переконань та підходу до навчання непараметричної моделі є алгоритм ітеративного оновлення для прискорення Гаусівського процесу, який відомий своїми заборонними обчисленнями з великими вхідними даними [43].

Висновки. Ґрунтуючись на проведеному аналізі, можна відзначити, методи та моделі аналізу стану навколишнього середовища за рахунок багатогранності та багатоаспектності підходів при побудові єдиної класифікації атмосферних моделей є складним завданням. З метою отримання достовірної інформації про стан атмосферного повітря приміських територій міста використовуються різні методи аналізу та моделювання стану довкілля.

Модель Лагранжа обчислює дисперсію забруднення повітря шляхом розрахунку безперервної траєкторії шлейфу. Вона рекомендується для оцінки

розсіювання та осадження забруднюючих речовин навколо області нестационарного повітряного потоку. У роботі цей метод використовується для розрахунку профілів розсіювання озону на прилеглий території як від точкового джерела. Для визначення рівня чистоти ми будемо використовувати нечітку логіку, тоді поняття "Рівень чистоти" стане лінгвістичною змінною.

Гаусова модель дозволяє розраховувати концентрації забруднюючих речовин в області моделювання по прямій лінії між джерелом та точкою розрахунку для кожної години та отримати модель забруднення викидами примігстральні території міста. сучасний метод оптичного контролю концентрації мікрочастинок пилу, домішок та мікроорганізмів у повітрі. За допомогою Лагер-Гауса пучка та подвійного фазового клину розроблено візуальний метод підрахунку мікрочастинок у повітрі, що особливо важливо при використанні чистих приміщень.

Статистичні моделі є корисним інструментом діагностики та передбачення якості повітря через інтерполяцію та екстраполяцію вимірних даних. Закономірності, що описуються за допомогою таких моделей, порівняно прості, що пояснює досить широке використання робіт цього напрямку у різних країнах.

Елементи моделей міських каньйонів плануємо використовувати для прогнозу концентрацій викидів на автомагістралях на коротких часових інтервалах (від кількох годин до доби).

Механізм реакції $\text{NO-NO}_2\text{-O}_3$, беручи до уваги час перебування газів в атмосфері вулиці – це окислення може бути не тільки молекулярним киснем но й озоном. Так як це реакція третього порядку, вона вимагає дуже високих концентрацій оксиду азоту та тривалого часу перебування газів, щоб надавати значний вплив. Це може мати місце при застійних погодних умовах, коли значні концентрації поллютантів спостерігаються кілька днів. Але моделей, що задовільно описують це явище, поки немає.

REFERENCES

1. Air Pollution Steady-State Advection-Diffusion Equation: The General Three-Dimensional Solution Daniela Buske, Marco Túllio Vilhena, Tiziano Tirabassi, Bardo Bodmann. Journal of Environmental Protection, Vol.3 No.9A, September 2012. DOI: 10.4236/jep.2012.329131. {in English}
2. Davidson Martins Moreira, M. T. Vilhena, J.C. Carvalho, Gervásio A. Degrazia Analytical solution of the advection–diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion, Environmental Modelling and Software 20(10): October 20051347–1351. {in English}
3. Studying the variation of eddy diffusivity on the behavior of advection-diffusion equation. Khaled Sadek Mohamed Essa, Aziz Nazer Mina, Hany Saleh

Hamdy, Fawzia Mubarak & Ayman Ali khalifa Journal of Astronomy and Geophysics Pages 10-14 | 2018, : <https://doi.org/10.1016/j.nrjag.2018.02.003>. {in English}

4. A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation J.S. Pérez Guerrero, L.C.G., J.F. Oliveira-Júnior , P.F.L. Heilbron Filho, A.G. Ulke Atmospheric Environment Volume 55, August 2012, Pages 201-212. {in English}

5. Assessment of the unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation for stable conditions L.C.G. Pimentel, J.S. Pérez Guerrero, A.G. Ulke, F.P. Duda and P.F.L. Heilbron Filho Published:08 July 2014 <https://doi.org/10.1098/rspa.2014.0021>. {in English}

6. Numerical Investigation of the Effect of Grids and Turbulence Models on Critical Heat Flux in a Vertical Pipe. Xiaomeng Dong, Zhijian Zhang, Dong Liu, Zhaofei Tian & Guangliang Chen. Original research, article Front. Energy Res., 03 July 2018. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2018.00058>. {in English}

7. Stochastic Modelling of Turbulent Flows for Numerical Simulations Carlo Cintolesi & Etienne Mémin Classical and Modern Topics in Fluid Dynamics and Transport Phenomena 2020, 5(3), 108; <https://doi.org/10.3390/fluids5030108>. {in English}

8. Recent advances on the numerical modelling of turbulent flows Applied C.D. Argyropoulos & N.C. Markatos -Mathematical Modelling, 39(2), 693-732 - January 2015 <https://doi.org/10.1016/j.apm.2014.07.001>. {in English}

9. A Multiscale Approach for the Numerical Simulation of Turbulent Flows with Droplets. Juan M. Gimenez, Sergio R. Idelsohn, Eugenio Oñate & Rainald Löhner. Arch Comput Methods Eng. 2021 Jun 26 : 1–20. doi: 10.1007/s11831-021-09614-6. {in English}

10. Evaluation of lagrangian particle dispersion models in turbulent flows. S. Laín & C.A. Grillo Chemical Engineering Communications V. 195, 2007 -. Issue 3 Pages 189-208. <https://doi.org/10.1080/00986440701569010>. {in English}

11. Comparison of Gaussian Plume Model and Lagrangian Particle Model for the Application of Coastal Air Quality Modelling American Journal of Environmental and Resource Economics Volume 4, Issue 4, December 2019, Pages: 152-158. <http://www.sciencepublishinggroup.com/journal>. {in English}

12. Pisso, I., Patra, P., Takigawa, M. et al. Assessing Lagrangian inverse modelling of urban anthropogenic CO₂ fluxes using in situ aircraft and ground-based measurements in the Tokyo area. Carbon Balance Manage 14, 6 (2019). <https://doi.org/10.1186/s13021-019-0118-8>. {in English}

13. Charged particle scattering problem with a complex-range Gaussian basis D.A. Sailaubek, O.A. Rubtsova & V. I. Kukulín The European Physical Journal A, V. 54, Article number: 126 (2018). {in English}

14. Gaussian determinantal processes: A new model for directionality in data Subhroshekhkar Ghosh, Philippe Rigollet Proceedings of the National Academy of

Sciences Jun 2020, 117 (24) 13207-13213; DOI: 10.1073/pnas.1917151117. {in English}

15. Petersen, W. User's guide for HIWAY-2, a highway air pollution model. EPA600/8-80-018 / W. Petersen. - North California: EPA, 1980. - 69 p. 114. {in English}

16. Benson, P. CALINE4 — a dispersion model for predicting air pollutant concentrations near roadways. FHWA/CA/TL-84/15 / P. Benson. - Sacramento, CA, California Department of Transportation, 1984. - 45 p. {in English}

17. Benson, P. A review of the development and application of CАБГМЕЗ and 4 models / P.A. Benson // Atmospheric Environment. - 1992. - V. 26B:3. - P. 379 - 390. {in English}

18. Chock, D.P. A simple line-source model for dispersion near roadway / D.P. Chock // Atmospheric Environment. - 1978. - V. 12. - P. 823 - 829. {in English}

19. Luhar, A. General Finite Line Source Model for Vehicular Pollution Dispersion / A. Luhar, R.A. Patil // Atmospheric Environment. - 1989. - V. 23. - P. 555 -562. {in English}

20. Kono, H. A micro-scale dispersion model for motor vehicle exhaust gas in urban area - OMG VOLLnVIE-SOURCE model / H. Kono, S. Ito // Atmospheric Environment. - 1990. - V. 24B:2. - P. 243 - 251. {in English}

21. Мониторинг качества атмосферного воздуха для оценки здоровья человека // Региональные публикации ВОЗ, Европейская серия. – Копенгаген, 2001. - № 85. — 293 с. {in Russian}

22. Csanady, G. T. Crosswind Shear Effects on Atmospheric Diffusion / G.T. Csanady // Atmospheric Environment - 1972. - V. 6. - P. 221 - 232. {in English}

23. A dispersion modelling system for urban air pollution Ari Karppinen [and oth.]. -Helsinki: FMI Publications on Air Quality, 1997. - 30 p. 115. DOI:10.13140/2.1.4386.6244. {in English}

24. Qin, Y. Dispersion of Vehicular Emission in Street Canyon. Guangzhou City, South China (PRC) / Y. Qin, S.C. Kot // Atmospheric Environment. - 1993. - V. 27B.-№3.-P.283-291 . {in English}

25. Physical Modeling of Flow Field inside Urban Street Canyons. Xian-Xiang Li, Dennis Y. C. Leung, Chun-Ho Liu &K. M. Lam Journal of Applied Meteorology and Climatology 2008, V. 47, Issue 7, P:2058–2067.

DOI:<https://doi.org/10.1175/2007JAMC1815.1>. {in English}

26. Yamartino, R.J. Development and evaluation of simple models for flow, turbulence and pollutant concentration fields within in urban area street canyon / R.J. Yamartino, G. Wiegand // Atmospheric Environment. — 1986. - V. 35. - P. 2137 — 2156. {in English}

27. Eerens, H.C. The CAR model: The Dutch method to determine city street air quality / H.C. Eerens, C.J. Sliggers, K.D. Hout // Atmospheric Environment. — 1993.-V.27B.-№ 4.-P . 389-399 . {in English}

28. Hertel, O. Modelling from traffic in a street canyon. Evaluation of data and model development. DMU Luft A-129 / O. Hertel, R. Berkowicz. - Roskilde: National Environmental Research Institute, 1989. — 77 p. {in English}
29. Schattanek, G. EPA User's Guide to CAL3QHC - A modelling methodology for predicting Pollutant concentrations near roadway intersections / G. Schattanek, E. Kahng, T. Stratou, T.N. Braverman. - USEPA, 1990. - 243 p. {in English}
30. Berkowicz, R. Using measurements of air pollution in streets for evaluation of urban air quality - meteorological analysis and model calculations / R. Berkowicz, F. Palmgren, O. Hertel // *Sci. Total Environ.*. - 1996. Vol. 189/190. - P. 259 -265. {in English}
31. New Modified Urban Canyon Models for Satellite Signal Propagation Prediction. IEEE Access, 2019, V. 7, P.25298.- 25307. DOI: 10.1109/ACCESS.2019.2900958. {in English}
32. Palmgren, F. Effects of reduction of NO_x on NO₂ levels in urban streets / F. Palmgren, R. Berkowicz, O. Hertel, E. Vignati // *Sci. Total Environ.*. - 1996. Vol. 189/190.-P. 409-415 . {in English}
33. Bower, J.S. A winter NO₂ smog episode in the U.K. / J.S. Bower, G.F.J. Broughton, J.R. Stedman, M.L. Williams // *Atmospheric Environment*. — 1994. — Vol. 28.-P . 461-475. {in English}
34. Analysis and interpretation of air quality data from an urban roadside location in Central London over the period from July 1991 to July 1992 / R.G. Derwent [and oth.] // *Atmospheric Environment*. - 1995. - Vol. 29. - P. 923-946. {in English}
35. Hov, O. Street canyon concentration of nitrogen dioxide in Oslo. Measurements and model calculations / O. Hov, S. Larsen // *Environ Sci. Technol.* - 1984. — Vol. 18.-P. 82-87 . {in English}
36. APPETISE (IST-99-11764), Air pollution episodes: modelling tools for improved smog management. - Anglia Polytechnic University, Cambridge, UK, 2001. - 23 P. {in English}
37. Glen, W.G. Relating meteorological variables and trends in motor vehicle emissions to monthly urban carbon monoxide concentrations / W.G. Glen, Nip. Zelenka. Re. Graham // *Atmospheric Environment*. — 1996. — V. 39. — P. 4225 — 4232. {in English}
38. Revisiting urban air quality forecasting: a regression approach. Kostas Karatzas, Nikos Katsifarakis, Cezary Orłowski & Arkadiusz Sarzyński. *Vietnam Journal of Computer Science* V.5, P. 177–184 (2018). {in English}
39. Comrie, A.C. Climatology and forecast modelling of ambient carbon monoxide in Phoenix, Arizona / A.C. Comrie, K. Diem // *Atmospheric Environment*. — 1999. - V. 33. - P. 5023 - 5036. {in English}

40. Sharma, P. Application of extreme value theory for predicting violations of air quality standard for an urban road intersection / P. Sharma, M. Khare, S.P. Chakrabarsi // *Transp. Res. D4.* - 1999. - P. 201 - 216. {in English}

41. Sharma, P., Khare M. Real-time prediction of extreme ambient carbon monoxide concentrations due to vehicular exhaust emissions using univariate linear stochastic models / P. Sharma, M. Khare // *Transp. Res. D5.* - 2000. - P. 59 - 69. {in English}

42. Can fuzzy set theory bring complex issues in sizing air quality monitoring network into focus? Kamal Jyoti Maji, Anil Kumar Dikshit & Ashok Deshpande. , V.8, P.2118–2128 (2017). <https://link.springer.com/article/10.1007/s13198-014-0327-1>. {in English}

43. Scalable belief updating for urban air quality modeling and prediction Xiuming Liu, Edith Ngai, Dave Zachariah. *ACM/IMS Trans. Data Sci.*, Vol. 2, №.1 2020. DOI: <https://doi.org/10.1145/3402903>. {in English}

д.т.н., профессор Татарченко Г.О.,

Восточноукраинский национальный университет имени Владимира Даля

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСSEИВАНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ

В работе проведен анализ методов и моделей состояния окружающей среды и установлено, что за счет многогранности и многоаспектности подходов при построении единой классификации атмосферных моделей является сложной задачей. Определено, модель Лагранжа вычисляет дисперсию загрязнения воздуха путём расчета непрерывной траектории шлейфа и этот метод можно использовать для расчета профилей рассеяния озона на прилегающей территории от точечного источника. Для определения уровня чистоты использовать нечеткую логику, тогда понятие "уровень чистоты" станет лингвистической переменной. Гауссова модель позволяет рассчитывать концентрации загрязняющих веществ в области моделирования по прямой линии между источником и точкой расчета для каждого часа и получить модель загрязнения выбросами при магистральной территории города. Статистические модели являются полезным инструментом диагностики и предсказания качества воздуха через интерполяцию и экстраполяцию измеренных данных. Элементы моделей городских каньонов планируем использовать для прогноза концентраций выбросов на автомагистралях на коротких временных интервалах (от нескольких часов до суток). Реакция NO-NO₂-O₃ требует очень высоких концентраций оксида азота и длительного времени нахождения газов, чтобы оказывать значительное влияние. Это может иметь место при застойных

погодных условиях, когда значительные концентрации поллютантов наблюдаются несколько дней. Но моделей, удовлетворительно описывающих это явление, пока нет.

Ключевые слова: моделирование; рассеяние; загрязняющие вещества; атмосфера; город; урбанизация.

Doctor of Technical Sciences, Professor **Tatarchenko Halyna**,
Volodymyr Dahl East Ukrainian National University, Sieverodonetsk, Ukraina

THEORETICAL ASPECTS OF MODELING THE DISPERSION OF POLLUTANTS IN THE ATMOSPHERE

The paper analyzes the methods and models of the state of the environment and found that due to the versatility and diversity of approaches in building a unified classification of atmospheric models is a difficult task. It is determined that the Lagrange model calculates the dispersion of air pollution by calculating a continuous plume trajectory and this method can be used to calculate the profiles of ozone scattering in the surrounding area from a point source. To determine the level of purity, use fuzzy logic, then the concept of "level of purity" will become a linguistic variable. The Gaussian model makes it possible to calculate the concentration of pollutants in the simulation area in a straight line between the source and the calculation point for each hour and obtain a model of pollution by emissions at the main city territory.

Statistical models are a useful tool for diagnosing and predicting air quality through the interpolation and extrapolation of measured data. We plan to use elements of urban canyon models to predict emission concentrations on highways over short time intervals (from several hours to days). The NO-NO₂-O₃ reaction requires very high nitric oxide concentrations and long residence times for the gases to have a significant effect. This can take place under stagnant weather conditions, when significant concentrations of pollutants are observed for several days. However, there are no models that satisfactorily describe this phenomenon.

Key words: modeling; dispersion; pollutants; atmosphere; city; urbanization.