УДК 528.9

**С.Я. МАЙСТРЕНКО[*], О.В. ХАЛЧЕНКОВ[*], Т.О. ДОНЦОВ-ЗАГРЕБА[*], В.П. БЕСПАЛОВ[*], К.В. ХУРЦИЛАВА[*], О.О. ПОЛОНСЬКИЙ[*], І.В. КОВАЛЕЦЬ[*]**

# ВЕБ-СИСТЕМА ПРОГНОЗУВАННЯ АТМОСФЕРНОГО ЗАБРУДНЕННЯ В УКРАЇНІ НА ОСНОВІ ЛАНЦЮГА МОДЕЛЕЙ ПРОГНОЗУ ПОГОДИ ТА АТМОСФЕРНОЇ ДИСПЕРСІЇ

[*]Інститут проблем математичних машин и систем НАН України, м. Київ, Україна

***Анотація.*** *У представленій роботі запропонована інформаційна технологія, яка дозволяє прогнозувати атмосферне поширення забруднюючих речовин у результаті аварійних викидів в Україні на основі ланцюга моделей чисельного прогнозування погоди та атмосферного переносу, а також веб-технологій для завдання вхідних даних, отримання та візуалізації результатів. Для прогнозування забруднення атмосфери після аварійного викиду в Україні створена і встановлена для дослідної експлуатації пілотна версія веб-системи. У системі можна проводити розрахунки поширення на відстані до 3000 км від джерела. Система може бути доопрацьована для роботи у хмарній інфраструктурі. Модель атмосферної дисперсії CALPUFF призначена для розрахунку переносу трьох основних типів забруднень: аерозолів, газів і пасивної домішки. Зазначені значення параметрів описують сухі випадіння газів, типові геометричні характеристики забруднюючих речовин, що моделюються у вигляді частинок, а також типові параметри вологого випадіння. Користувачам системи були надані можливості візуалізації результатів моделювання, такі, як просторово-часовий розподіл концентрацій і випадінь у картографічній формі та у вигляді часових діаграм концентрацій і випадінь у комірках сітки. Якщо необхідно виводити результати в певних точках, які не співпадають із центрами комірок сітки, користувач може вказати точкові рецептори для виведення результатів. Крім стандартних характеристик, користувачам системи надається можливість виведення результатів моделювання, які можна порівняти з нормативними характеристиками забруднення, а саме: з середньодобовими і максимальними концентраціями забруднюючих речовин. Розроблена інформаційна технологія може бути використана в Українському гідрометеорологічному центрі, Державній службі з надзвичайних ситуацій і інших відомствах, яким потрібні докладні дані гідрометеорологічного аналізу і прогнозування. Розроблені сервіси також можуть бути надані широкому колу дослідників навколишнього середовища в рамках Європейської хмарної ініціативи.*

***Ключові слова:*** *забруднення атмосфери, атмосферне перенесення і транспорт, інформаційно-аналітичні системи, веб-системи.*

***Аннотация.*** *В представленной работе предлагается информационная технология, которая позволяет прогнозировать атмосферное распространение загрязняющих веществ в результате аварийных выбросов в Украине на основе цепочки моделей численного прогнозирования погоды и атмосферного переноса, а также веб-технологий для задания входных данных, получения и визуализации результатов. Для прогнозирования загрязнения атмосферы после аварийного выброса в Украине создана и установлена для опытной эксплуатации пилотная версия веб-системы. В системе можно проводить расчеты распространения на расстоянии до 3000 км от источника. Система может быть доработана для работы в облачной инфраструктуре. Модель атмосферной дисперсии CALPUFF предназначена для расчета переноса трех основных типов загрязнений: аэрозолей, газов и пассивной примеси. Указанные значения параметров описывают сухое осаждение газов, типичные геометрические характеристики загрязняющих веществ, моделируемых в виде частиц, а также типичные параметры влажного осаждения. Пользователям системы были предоставлены возможности визуализации результатов моделирования, таких, как пространственно-временное распределение концентраций и осаждений в картографической форме, а также в виде временных диаграмм концентраций и осаждений в ячейках сетки. Если необходимо*

© Майстренко С.Я., Халченков О.В., Донцов-Загреба Т.О., Беспалов В.П., Хурцилава К.В., Полонський О.О., Ковалець І.В., 2019

*выводить результаты в определенных точках, которые не совпадают с центрами ячеек сетки, пользователь может указать точечные рецепторы для вывода результатов. Помимо стандартных характеристик, пользователям системы предоставляется возможность вывода результатов моделирования, которые можно сравнить с нормативными характеристиками загрязнения, а именно с среднесуточными и максимальными концентрациями загрязняющих веществ. Разработанная информационная технология может быть использована в Украинском гидрометеорологическом центре, Государственной службе по чрезвычайным ситуациям и других ведомствах, которым требуются подробные данные гидрометеорологического анализа и прогнозирования. Разработанные сервисы также могут быть предоставлены широкому кругу исследователей окружающей среды в рамках Европейской облачной инициативы.*
***Ключевые слова:*** *загрязнение атмосферы, атмосферный перенос и транспорт, информационно-аналитические системы, веб-системы.*

***Abstract.*** *In the paper the information technology is suggested, it allows predicting the atmospheric distribution of pollutants resulting from emergency emissions in Ukraine based on a chain of models of numerical weather forecasting and atmospheric dispersion, as well as web technologies for setting input data, obtaining and visualization of the results. A pilot version of the web-system of atmospheric pollution forecasting following accidental release in Ukraine was created and installed for test operation. The system allows calculations of dispersion up to 3000 km distances from the source. The system can be configured to operate in cloud infrastructure. The atmospheric dispersion model CALPUFF is configured to calculate the transport of three main types of pollution: aerosols, gases and passive tracer. The specified values of the parameters describe the dry deposition of gases, the typical geometric characteristics of the pollutants simulated as particles, as well as the typical parameters of wet deposition. The users of the system were provided with the possibilities of visualization of the simulation results, such as spatial- temporal distributions of concentrations and deposition in cartographic form and in the form of time-plots of concentrations and depositions in grid cells. If it is necessary to output results at specific points that do not coincide with the grid cell centers, the user can specify a number of point receptors for output of the results. In addition to the standard characteristics, the users of the system are provided with the possibility of output of simulation results, which can be compared with the normative characteristics of pollution, namely, daily average and maximum concentrations of pollutants. The developed information technology could be used in the Ukrainian Hydrometeorological Center, the State Emergency Situations Service, and other agencies that require detailed data of hydrometeorological analysis and forecasting. Developed services could be also provided to a wide range of environmental researchers within the framework of the European Cloud Initiative.*
***Keywords:*** *air pollution, atmospheric dispersion and transport, information analytical systems, web-systems.*

## 1. Вступ

Економічна і суспільно-політична ситуація в Україні та військові дії у регіонах розташування техногенно-небезпечних виробництв і транспортної інфраструктури підвищує небезпеку виникнення екологічних катастроф техногенного характеру, результатом яких можуть бути викиди небезпечних речовин у повітряне середовище України. Масштабні техногенні аварії і катастрофи мають різнобічні наслідки для життя і здоров’я населення. Особливо це стосується масштабних техногенних аварій поблизу великих міст України. Водночас, в Україні практично не існує оперативної системи прогнозування наслідків та реагування на такі катастрофи. Винятком є тільки атомні електростанції, для яких в Україні в рамках проектів технічної допомоги Євросоюзу за участю авторів статті у декількох відомствах впроваджується система Євросоюзу з реагування на радіаційні аварії РОДОС [1]. Прогнозування наслідків важких техногенних аварій неможливе без використання сучасних чисельних методів прогнозування погоди та моделей розповсюдження забруднень, здатних описувати процеси у масштабах від ~1 до ~1000 км. У попередній роботі [2] було розроблено прототипну версію системи прогнозування атмосферного розпо-

всюдження забруднень внаслідок важких техногенних аварій на довільні відстані від джерела викиду.

*Метою* даної роботи є реалізація можливості моделювання різних типів забруднень (гази, аерозолі, пасивна домішка) у даній системі, створення можливостей виведення через інтерфейс системи таких характеристик забруднень, які можна порівнювати з існуючими нормативами, та інтеграція системи з даними оперативного прогнозування погоди в Україні.

## 2. Автоматизована система прогнозування метеорологічних умов в Україні

Система метеорологічного прогнозування WRF-Україна [3] на основі американської метеорологічної моделі WRF (www.wrf-model.org) у даний час впроваджена в Українському гідрометцентрі для метеорологічного забезпечення системи РОДОС [4], для прогнозування паводків у Карпатах [5], а також у складі інших прогностичних систем. Вихідними даними системи є тривимірні та розподілені у часі поля основних метеорологічних характеристик: компонент швидкості вітру, вологості, температури та тиску. Крім тривимірних полів, система розраховує ряд поверхневих характеристик, таких як опади, потік імпульсу, тепла та вологи від поверхні Землі, висота шару перемішування. У даній роботі використовуються такі самі налаштування системи WRF-Україна, як і в роботі [6]. Модель проводить розрахунки для трьох областей, але у даній роботі використовуються результати прогнозування WRF-Україна тільки у зовнішній області – D01, яка охоплює значну територію, включаючи Україну, з просторовим дозволом 0,15 град. (приблизно 15 км по довготі та 13 км по широті).

## 3. Модель атмосферного перенесення та її налаштування у складі системи

### 3.1. Ланцюг моделей атмосферного перенесення CALMET/CALPUFF

Для розрахунку атмосферного перенесення використовувалася рекомендована Агентством з охорони навколишнього середовища (США) модель CALMET-CALPUFF [7]. Ця модель складається з географічних препроцесорів (TERREL, CTGPROC та MAKEGEO), метеорологічного препроцесора CALMET і лагранжево-ейлерової моделі атмосферного переносу CALPUFF. Модель реалізована у вигляді структури послідовно виконуваних підпрограм із жорстко вказаними шляхами між проміжними вхідними та вихідними файлами.

Робота моделі починається з інтерполяції даних про підстилаючу поверхню на розрахункову сітку. У цьому приймають участь топографічний препроцесор TERREL та програма CTGPROC, що інтерполює дані про категорії землекористування. Ці програми зчитують топографічні дані та дані про категорії землекористування з завчасно створених файлів у форматі GeoTIFF (як джерело топографічних даних використовується глобальний набір SRTM30, як джерело даних про категорії землекористування – Global Land Cover 2000). Дані в цих файлах покривають усю область прогностичного розрахунку метеорологічної моделі WRF, тому дозволяють користувачу довільно вибирати розрахункову сітку в межах оперативного прогнозу погоди. Далі препроцесор MAKEGEO оброблює ці дані і створює файл geo.dat, що містить всю необхідну для моделі CALMET інформацію про підстилаючу поверхню: інтерпольовані на розрахункову сітку поля категорій землекористування, топографічних висот, параметра шорсткості, альбедо, відношення Боуена (відношення кількості тепла, отриманого водною поверхнею, до кількості тепла, затраченого на випаровування), теплових потоків, індексу листової поверхні (LAI).

На наступному етапі програма CALWRF конвертує файл із прогностичними метеорологічними полями, отриманими з моделі WRF, у вхідний файл метеорологічної моделі CALMET. Метеорологічний препроцесор CALMET як вхідні дані використовує інтерпольовані на розрахункову сітку дані про підстилаючу поверхню та тривимірні метеорологі-

чні поля, отримані в результаті роботи метеорологічної моделі WRF. Вихідними даними метеорологічного препроцесора є тривимірні поля вітру, температури, висоти примежового шару, категорії стійкості та інші метеорологічні змінні, необхідні для розрахунку атмосферного переносу, такі, як динамічна швидкість, масштаб Моніна-Обухова, висота шару перемішування. При інтерполяції полів вітру на власну розрахункову сітку в CALMET використовується інтерполяційна процедура мінімізації дивергенції, що дозволяє приблизно врахувати вплив нерівностей топографії на поле вітру.

Лагранжево-ейлерова модель CALPUFF дозволяє розрахувати поширення забруднень, використовуючи вихідні дані препроцесора CALMET і дані про джерела забруднень. У лагранжево-ейлерових моделях використовується представлення тривалого викиду забруднювачів у вигляді послідовності викидів «пуфів» кінцевої тривалості (менше 1 хв). На кожному часовому кроці пуфи переносяться вітром (це описується кінематичними рівняннями для координати центру мас пуфа). Однак, крім координат центру мас, пуфи характеризуються також розподілом концентрації. Цей розподіл відповідає відомим напівемпіричним співвідношенням, що описують просторово-часовий розподіл речовини внаслідок турбулентної дифузії. Характеристики розподілу речовини всередині пуфа розраховуються на підставі обраної параметризації у залежності від характеристик турбулентності і часу існування пуфа. Загальна маса речовини в пуфі змінюється внаслідок вологого і сухого випадіння, яке розраховується на підставі параметризації з урахуванням типу підстилаючої поверхні, швидкості вітру, інтенсивності опадів. Концентрація речовини обчислюється як сума вкладів окремих пуфів. У розрахунках передбачається повне відображення хмари від поверхні Землі.

Для роботи з результатами розрахунку CALPUFF використовується постпроцесор CALPOST, який дозволяє обробляти залежні від часу поля концентрацій, зокрема, визначати середні концентрації, максимальні, мінімальні значення і частоти перевищення заданих порогових значень.

### 3.2. Налаштування моделі атмосферного перенесення та її інтегрування з даними чисельного прогнозування погоди

Переважна більшість налаштувань моделей відповідають стандартним опціям за замовчуванням. Як налаштування кожної з вищевказаних програм необхідно вказати параметри, що визначають бажану розрахункову сітку, такі як UTM-координати південно-західного кута розрахункової області, кількість комірок вздовж осей X та Y і характерний розмір кожної комірки. Конвертор CALWRF як налаштування потребує виключно назву і шлях до актуального файла з оперативним метеорологічним прогнозом, отриманим у результаті роботи моделі WRF. Для налаштування моделей CALMET, CALPUFF та CALPOST користувачу потрібно вказати час та дату початку і кінця моделювання у відповідності з наявним метеорологічним прогнозом. Важливою особливістю розрахунку моделі CALMET з використанням прогностичних метеорологічних даних є те, що модель може почати розрахунок тільки у темну пору доби, що програмно реалізовано обмеженням на можливу годину запуску виключно в період від півночі до шостої години ранку. Модель CALMET в оперативному режимі використовує стандартний набір із десяти шарів по вертикалі, що відповідають рівням 0,20, 40,80, 160, 300, 600, 1000, 1500, 2200 та 3000 метрів.

Серед налаштувань моделі атмосферного перенесення CALPUFF однією з найважливіших є параметризація турбулентного перемішування. У даній роботі використовується опція ICST [7], згідно з якою просторовий розподіл концентрації речовини у пуфі розраховується у залежності від динамічної швидкості, масштабу Моніна-Обухова, висоти примежового шару і часу існування пуфа. Для налаштування CALPUFF потрібно також вказати повний список усіх забруднювачів, що моделюються, а також вказати, які з цих забрудню-

вачів моделюються як газ, які моделюються як частинки і які моделюються як інертні гази (без осідання).

Для моделювання процесів осідання необхідно додатково вказати ряд характеристик, які у загальному випадку залежать від речовини забруднювача. У поточній реалізації оперативної моделі для усіх речовин використовуються фіксовані значення, наведені у табл. 6. Для речовин, що моделюються як гази, вибрані значення параметрів, які відповідають характеристикам, що, згідно з [7, 8], рекомендовані при моделюванні газу SO2 (крім константи дисоціації α*, рекомендоване значення якої для SO2 значно більше, ніж типові значення для інших газів, тому використовується значення, рекомендоване для інших газів). Для моделювання речовин, які вважаються частинками, використовуються значення параметрів, що відповідають таким розповсюдженим забруднювачам, як SO4 та NO3 [7, 8]. Якщо є потреба у виводі результатів у конкретно вказаних точках, додатково користувач може вказати певну кількість точкових рецепторів, у яких також будуть пораховані концентрації.

Як налаштування постпроцесор CALPOST використовує список забруднювачів та деякі спеціальні параметри, що дозволяють вказати бажаний вигляд результатів (програма дозволяє отримати середні, максимальні, почасові, тригодинні, 24-годинні характеристики забруднення, а також перевищення порогових значень).

Таблиця 1 – Прийняті значення параметрів, що використовуються при моделюванні процесу вологого та сухого осідання забруднень

| Параметр | Значення |
|---|---|
| *Параметри, необхідні для моделювання сухого осідання газів* | |
| Коефіцієнт дифузії (см2/с) | 0,1509 |
| Константа дисоціації рідинної фази α* | 1 |
| Реактивність забруднювача | 8 |
| Мезофільний опір (с/см) | 0 |
| Константа Генрі | 0,04 |
| *Геометричні розміри частинок (використовуються при моделюванні осідання частинок)* | |
| Середньомасовий діаметр частинок (мкм) | 0,48 |
| Стандартне відхилення діаметра (мкм) | 2 |
| *Параметри, необхідні для моделювання вологого осідання* | |
| Коефіцієнт вимивання для опадів у рідинній фазі [с-1] | 0,0001 |
| Коефіцієнт вимивання для опадів у твердій фазі [с-1] | 0,00003 |

## 4. Інформаційна технологія прогнозування атмосферного забруднення

Середовище розробки та архітектура пілотної версії веб-системи оперативного прогнозування атмосферного забруднення з високою роздільною здатністю подібні до описаних у [9].

Для формування прогнозу користувач повинен задати необхідні параметри, такі, як назва для ідентифікації та область прогнозу, а також інформація про всі наявні джерела забруднення (рис. 1):

– назва для ідентифікації джерела;
– координати джерела;
– висота джерела в метрах;
– хімічно-небезпечна речовина (ХНР);
– кількість ХНР у кг;
– дата та час початку дії джерела;

– термін дії джерела.

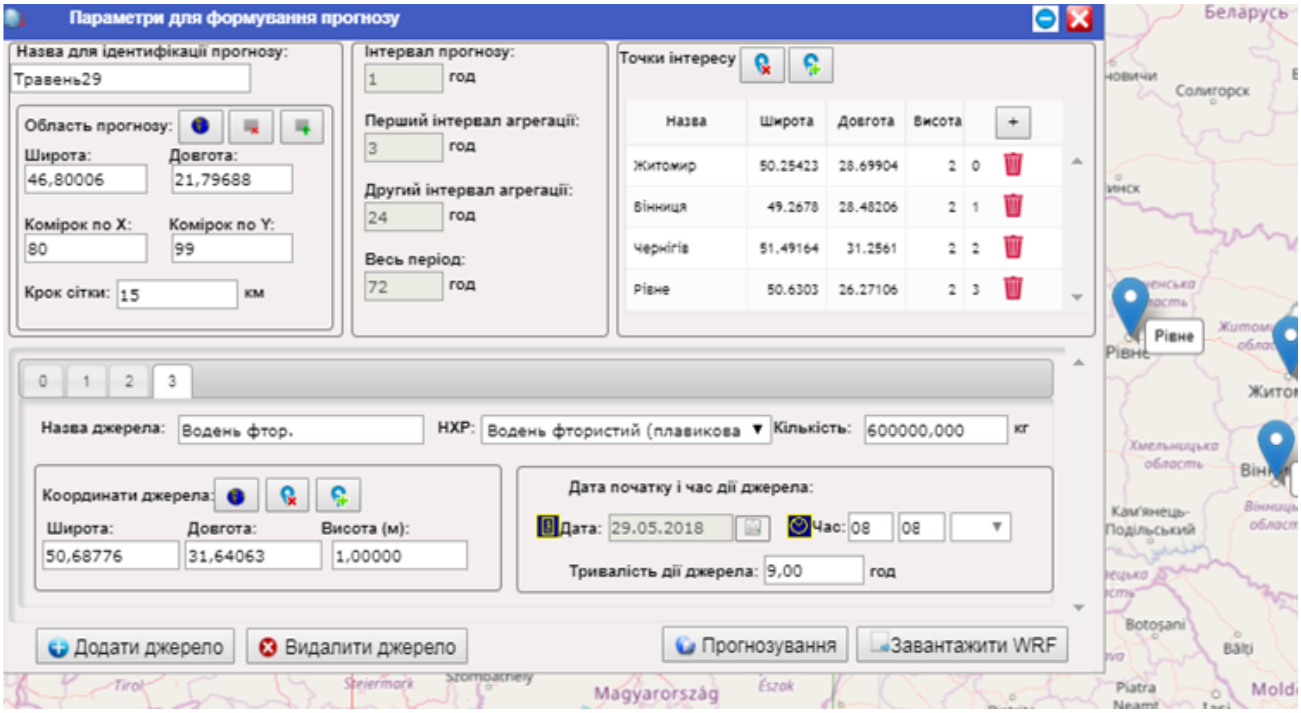
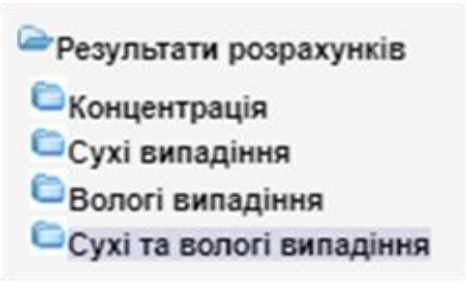



Рисунок 1 – Результати вибору параметрів прогнозу



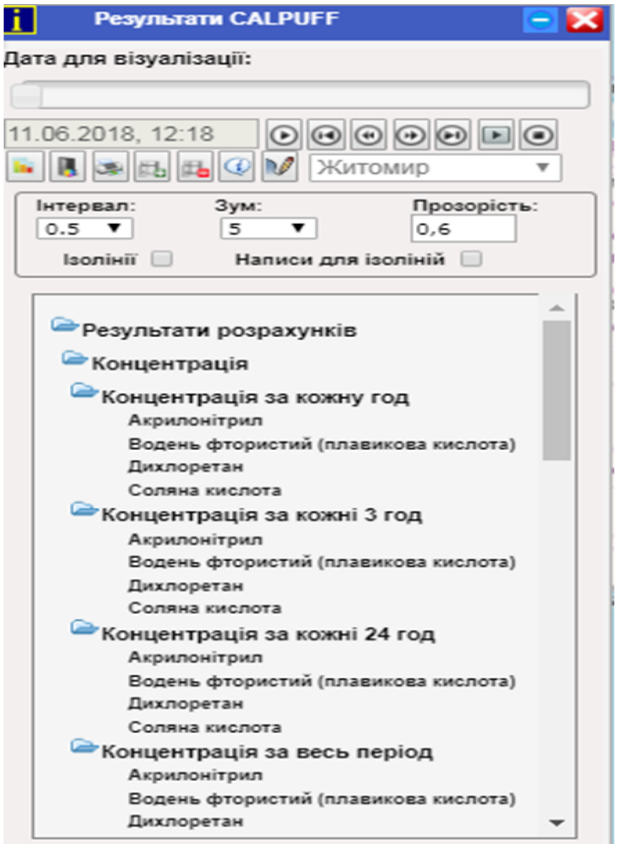




Рисунок 2 – Типи прогнозних показників (зліва) та параметри перегляду результатів прогнозу (справа)

Інтервал початку дії джерел не може перевищувати 71 год. Початок прогнозу визначається за найменшою датою початку дії серед всіх указаних джерел. У разі потреби користувач може задати точки інтересу (точкові рецептори), для яких буде сформовано прогноз за координатами. Інформація стосовно сформованих користувачем прогнозів зберігається в журналі БД і може використовуватись як для перегляду результатів прогнозування, так і для формування нових прогнозів для подібних параметрів.

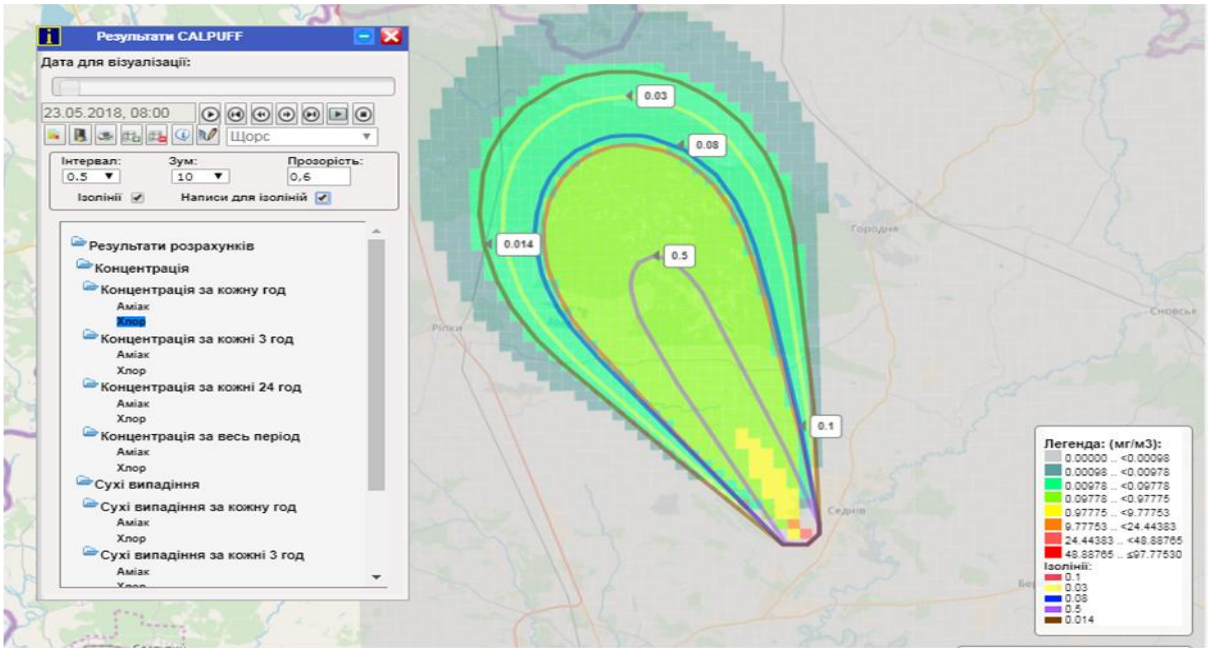



Рисунок 3 – Концентрація хлору

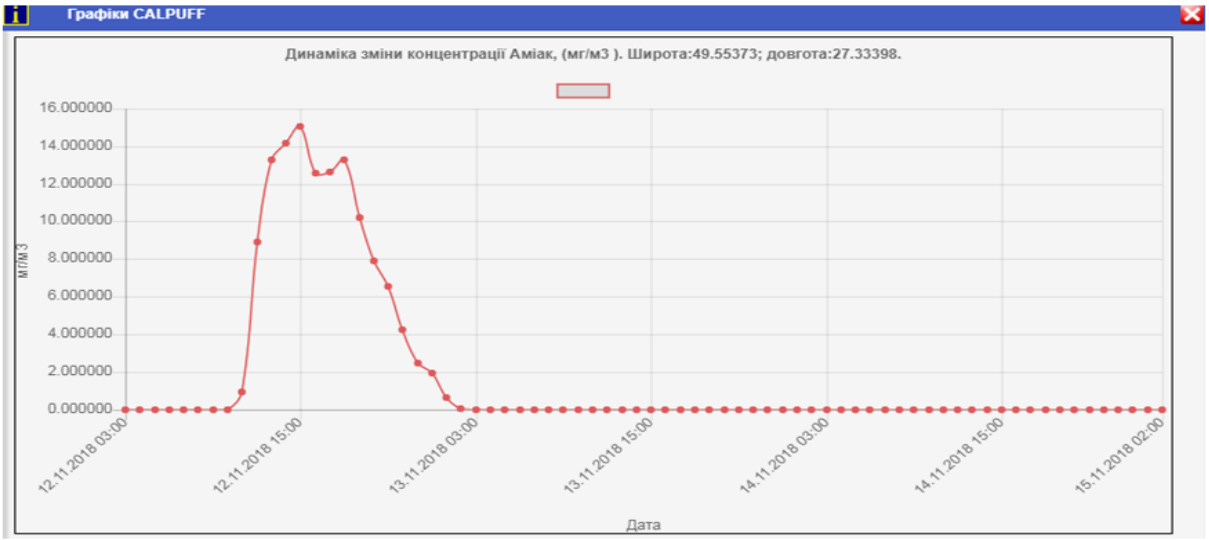



Рисунок 4 – Динаміка зміни концентрації аміаку для комірки сітки

Після вибору всіх параметрів та ініціювання формування прогнозу даний розрахунок буде поставлено до черги. У разі успішного формування прогноз отримає статус «виконано». Після цього користувач може переглянути результати отриманого прогнозу на екрані та у разі необхідності роздрукувати потрібне.

У результаті формування прогнозу користувач має можливість отримати інформацію щодо чотирьох типів прогнозних показників для всіх джерел забруднення (рис. 2).

Вологі випадіння можуть бути відсутніми. Для перегляду результатів прогнозування необхідно вибрати з переліку потрібний прогноз. На екрані з'явиться вікно з набором параметрів для перегляду (рис. 2). Користувач повинен вибрати джерело для конкретного типу прогнозного показника, дату прогнозу з 72-х можливих та ініціювати відображення результатів на цифровій карті (рис. 3). Для типу показника «Концентрація» в системі передбачені значення для побудови ізоліній за замовчуванням на основі визначених нормативів: максимальна разова доза та середньодобова.

Однак реальні значення концентрацій можуть бути значно менші або значно більші за значення за замовчуванням. У таких випадках користувач має можливість самостійно визначити значення для побудови ізоліній. Для типів показників: сухі випадіння, вологі випадіння та сухі і вологі випадіння – значення для побудови ізоліній за замовчуванням не передбачені і залежать від вибору користувача. Для вибраної комірки або точки інтересу можна активізувати побудову графіка (рис. 4).

## 5. Висновки

У роботі розроблено інформаційну технологію, що дозволяє прогнозувати атмосферне розповсюдження забруднень внаслідок аварійних викидів на основі даних моделей чисельного прогнозу погоди та веб-технологій для задання вхідних даних, отримання і візуалізації результатів. Створено та встановлено для тестової експлуатації пілотну версію веб-системи прогнозування атмосферного розповсюдження забруднень на відстані до 3000 км внаслідок аварійного викиду в довільній точці на території України, яка в майбутньому може бути доопрацьована для роботи у хмарній інфраструктурі.

Модель атмосферного перенесення CALPUFF конфігуровано для розрахунку перенесення трьох основних типів забруднень: аерозолів, газів та пасивної домішки. Задані значення параметрів, що описують сухе випадіння газів, типові геометричні характеристики забруднювачів, які моделюються як частинки, а також типові параметри вологого випадіння. У подальшому розвитку системи планується надати можливість більш гнучкого завдання параметрів випадіння.

Користувачу системи надано можливості візуалізації результатів моделювання просторово-часових розподілів концентрацій і випадінь забруднень у картографічному вигляді та у вигляді графіків часових залежностей концентрацій і випадінь у комірках сітки. Якщо є потреба у виводі результатів у конкретно вказаних точках, які не співпадають із центрами комірок сітки, користувач може вказати певну кількість точкових рецепторів для виведення результатів. Окрім стандартних характеристик, користувачу системи надано можливості виведення результатів моделювання, які можна співставляти з нормативними характеристиками забруднень, а саме: карти добових середніх та максимальних концентрацій забруднювачів.

Розроблена технологія може бути використана в Українському гідрометцентрі, Державній службі надзвичайних ситуацій, Міністерстві екології та інших відомствах, що потребують забезпечення детальними даними гідрометеорологічного аналізу і прогнозування. Розроблені сервіси можуть бути надані також і широкому колу дослідників навколишнього середовища у рамках реалізації Європейської хмарної ініціативи.

## СПИСОК ДЖЕРЕЛ

1. Ковалець І.В., Синкевич Р.О., Халченков О.В. [та ін.]. Адаптація системи РОДОС-Україна для прогнозування пожеж у Чорнобильській зоні відчуження. *Математичне та імітаційне моделювання систем. МОДС 2018*: тези доповідей Тринадцятої міжнар. наук.-практ. конф. (Чернігів-Жукін, 28–29 червня 2018 р.). Чернігів: ЧНТУ, 2018. С. 41–43.

2. Kovalets I.V., Maistrenko S.Y., Khalchenkov A.V. [et al.]. Povitrya web-based software system for operational forecasting of atmospheric pollution after manmade accidents in Ukraine. *Science and Innovation*. 2017. Vol. 13, N 6. P. 11–22.
3. Ковалець І.В., Майстренко С.Н., Донцов-Загреба Т.О. [та ін.]. Веб-система прогнозування метеорологічних умов для довільної території на детальних сітках. *Математичні машини та системи*. 2018. № 1. С. 78–89.
4. Халченков А.В., Ковалец И.В., Романенко А.Н. Адаптация метеорологической модели WRF для прогнозирования полей ветра вокруг Ривненской АЭС. *Математичні машини та системи.* 2015. № 1. С. 130–137.
5. Kovalets I.V., Kivva S.L., Udovenko O.I. Usage of the WRF-DHSVM model chain for simulation of extreme floods in mountainous areas: a pilot study for the Uzh River Basin in the Ukrainian Carpathians. *Natural Hazards.* Vol. 75, N 2. P. 2049–2063.
6. Ковалець І.В., Халченков О.В., Полонський О.О. Використання системи WRF-Україна для прогнозування агрометеорологічних умов. *Математичні машини і системи*. 2019. № 1. С. 36–48.
7. Scire J.S., Strimaitis D.G., Yamartino R.J. A user's guide for the CALPUFF dispersion model (Version 5). 1998. *Earth Tech. Inc*., Concord, MA. URL: http://www.src.com/calpuff/calpuff1.htm.
8. Cumulative Environmental Management Association. NOx Dispersion And Chemistry Assumptions in the CALPUFF Model. *RWDI Air Inc*. 2005. URL: http://library.cemaonline.ca/ckan/dataset/e0f03b24-25d3-4638-b5bd-d75e2c23bf97/resource/625c44ea-6bde-41aa-9b78-54fadc56ed53/download/20030034finalreportappedicesdisclaimerand.pdf.
9. Майстренко С.Я., Донцов-Загреба Т.О., Хурцилава К.В. [та ін.]. Інформаційна технологія зберігання та візуалізації даних гідрометеорологічного прогнозування на основі WRF-Україна. *Математичні машини і системи*. 2019. № 1. С. 56–67.

*Стаття надійшла до редакції 18.02.2019*