

УДК 519.6

DOI: 10.32626/2308-5878.2025-27.53-68

Ю. І. Першина*, **, д-р фіз.-мат. наук,

А. Д. Ковтун, аспірант**

*Національний технічний університет

«Харківський політехнічний інститут», м. Харків,

**Харківський національний університет радіоелектроніки, м. Харків

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОДІЛУ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН У ПОВІТРІ ВІД ПРОМИСЛОВОГО ЗАБРУДНЕННЯ

Сформульовано крайову задачу для опису процесів перенесення багатокомпонентних забруднювальних речовин у повітрі за наявності точкових джерел. Із використанням концепції локального потенціалу доведено теорему, що дозволяє побудувати алгоритм розв'язання задачі методом скінченних елементів (МСЕ). Вибір методу МСЕ обґрунтовано його ключовими перевагами: МСЕ забезпечує наближене розв'язання у вигляді аналітичного виразу; формалізує процедуру задоволення крайових умов шляхом вибору функціонала, для якого одна або обидві крайові умови є природними; дозволяє будувати апроксимацію навіть у випадках розривних коефіцієнтів або при наявності неоднорідного члена, що містить суму дельта-функцій Дірака.

Додатково розроблено алгоритм розв'язання нелінійної крайової задачі зі змінними коефіцієнтами, яка містить особливість у вигляді суми одиничних дельта-функцій Дірака. Математична модель розподілу забруднюючих речовин над заданою поверхнею враховує ефект початкового розсіювання забрудненого повітря і формулюється як двоточкова крайова задача для системи диференціальних рівнянь, що описують матеріальний баланс органічних забруднювачів у повітрі.

Сформульована математична модель опису процесу забруднення повітряних потоків навколо джерела викидів, розташованого на поверхні, що приводить до нелінійної крайової задачі. Розв'язання отримано за допомогою МСЕ, який дозволяє будувати змінні апроксимації у присутності особливостей, зокрема дельта-функцій Дірака. Варіаційну постановку задачі побудовано методом Рітца із включенням концепції локального потенціалу, запропонованої Гландорфом і Пригожиным.

Ключові слова: математичне моделювання, перенесення багатокомпонентних забруднювачів, метод скінченних елементів (МСЕ), крайова задача, дельта-функція Дірака, розсіювання забруднень, нелінійні диференціальні рівняння, метод Рітца, локальний потенціал, модифікований метод Ньютона, метод Гауса.

Вступ. Забруднення повітря викидами промислових підприємств залишається критичною екологічною та суспільно-санітарною проблемою. Серед основних забруднювачів важливу роль відіграють триоксид сірки (SO_3) та діоксид вуглецю (CO_2), які відповідно спричиняють кислотні опади та накопичення парникових газів. Точне моделювання поширення забруднень є надзвичайно важливим для ефективного регулювання, планування інфраструктури та оцінки впливу на довкілля.

У цьому дослідженні розроблено математичну модель для симуляції стаціонарного розподілу SO_3 та CO_2 у приземному шарі атмосфери за умови наявності кількох промислових точкових джерел (наприклад, димових труб). Перенесення забруднювачів описується системою пов'язаних рівнянь дифузії з реакцією, яка включає конвективне перенесення, нелінійні хімічні взаємодії та особливі джерела, змодельовані за допомогою дельта-функцій Дірака [1, 2].

Забруднення в міських і промислових регіонах характеризується складною динамікою внаслідок взаємодії хімічних компонентів, турбулентного розсіювання та локалізованих джерел викидів. Моделі, що імітують ці процеси, повинні враховувати неоднорідний рельєф місцевості, множинні точкові джерела та гетерогенні кінетичні реакції [3].

Традиційні моделі, такі як гаусівська модель шлейфу, моделі на базі ейлерівської сітки та методи обчислювальної гідродинаміки (CFD – Computational Fluid Dynamics), є широко використовуваними. Проте вони часто стикаються з труднощами забезпечення високої точності поблизу джерел викидів і при моделюванні систем із нелінійною хімічною взаємодією [4, 1]. Метод скінченних елементів (MCE) пропонує надійну альтернативу завдяки своїй здатності:

- обробляти неоднорідні геометрії та крайові умови;
- урахувувати нелінійні рівняння реакційно-дифузійного типу;
- моделювати локалізовані джерела викидів за допомогою дельта-функцій Дірака.

Забезпечувати високоточні розв'язки з використанням кусково-заданих базисних функцій.

Для врахування нелінійного та несамоспряженого характеру задачі ми застосовуємо варіаційне формулювання на основі методу Рітца [5], що дозволяє перетворити крайову задачу на задачу мінімізації функціонала. Структура цього функціонала ґрунтується на теорії локального потенціалу, запропонованій Гландорфом і Пригожиным [6], яка ефективно відображає взаємодію дифузії, конвекції та термодинамічної дисипації у відкритих хімічних системах.

Функціонал включає:

- дифузійні складові, пов'язані з процесами масопереносу;

- нелінійну хімічну кінетику, зокрема ефекти насичення, змодельовані згідно із законом Міхаеліса-Ментена [9, 10];
- локалізовані джерельні члени, представлені за допомогою дельта-функцій, що дозволяє точно моделювати викиди від дискретних джерел [2, 11].

Просторову область дискретизовано методом скінченних елементів (МСЕ) з використанням кусочно-лінійних (шапкоподібних) базисних функцій [1, 4, 8]. Це перетворює варіаційну постановку задачі на нелінійну алгебраїчну систему рівнянь розмірності $2(M+1)$ де $(M+1)$ число (МСЕ) вузлів.

Система розв'язується за допомогою модифікованого методу Ньютона з контролем кроку та діагональною регуляризацією для підвищення стійкості [12, 13]. Матриця Якобі обчислюється з використанням скінченно-різницьвих апроксимацій для контролю чутливості та збіжності.

Окрім обчислення концентрацій забруднювачів, модель також включає оптимізацію параметрів:

- просторове розміщення джерел викидів оптимізується з метою мінімізації сумарного навантаження забруднювачів у межах області [3, 9];
- кінетичні константи хімічних реакцій (наприклад, k_r, K_m, k_D) оцінюються шляхом асиміляції даних шляхом мінімізації відхилення між результатами моделі та синтетичними даними вимірювань [10, 14].

Важливою особливістю нашого підходу є подвійна стратегія оптимізації. Ми оптимізуємо не лише положення джерел, а й кінетичні коефіцієнти k_r, K_m, k_D , які відповідно характеризують швидкість реакції, поріг насичення та ефекти деградації. Перевірку здійснено із використанням синтетичних «експериментальних» даних з фізичним масштабуванням і доданим шумом, що імітує реальні польові умови.

Усі експерименти та процедури оптимізації виконуються в середовищі MATLAB із використанням як прямого моделювання, так і методів оберненої оптимізації. Синтетичні «експериментальні» дані з доданим шумом генеруються для імітації реальних атмосферних умов, включаючи фізичне масштабування до одиниць виміру мг/м^3 [3]. Ця гібридна модельно-оптимізаційна платформа забезпечує строгий, масштабований і фізично інтерпретований підхід до моделювання поведінки забруднювачів у повітрі. Вона є особливо придатною для застосування в управлінні промисловими викидами, екологічному моніторингу та плануванні міського середовища за наявності множинних точкових джерел і нелінійних перетворень.

Побудова математичної моделі розподілу забруднення в повітрі: Математичне описання технологічного процесу в багатокомпонент-

ній суміші включає рівняння матеріального балансу для кожної реагуючої компоненти. Рівняння матеріального балансу записуються у вигляді рівнянь дифузії з врахуванням джерел речовини [1, 7]

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \text{div}(D \cdot \text{grad} C_i) - \text{grad}(\vec{\omega} C_i) + F_i, \quad i = \overline{1, m}, \quad (1)$$

де C_i – концентрація i -ї компоненти; $\vec{\omega}$ – вектор швидкості матеріального потоку суміші; D – коефіцієнт сумарної дифузії; F_i – функція, яка визначає інтенсивність джерела i -ї компоненти; m – число реагуючих компонент.

Далі розглядаємо концентрацію кожної компоненти над деякою поверхнею як функцію лише поздовжньої координати x , а рівняння (1) розглянемо в одновимірній постановці.

Дифузійний перенос оцінюється коефіцієнтом поздовжнього перемішування. $D_L \rightarrow \infty$ здійснюється режим ідеального змішування, при $D_L \rightarrow 0$ – (при режимі ідеального витиснення).

Утворення нової речовини в результаті взаємодії між компонентами суміші забруднення здійснюється над кожною окремою поверхнею і становить неперервно розподілені джерела. Ці джерела речовини забруднення називаються точковими. Математично точкове джерело можна описати за допомогою одиничної імпульсної функції Дірака [10, 11] $q = q_{ik} \delta(x - x_{ik})$, де x_{ik} – координата k -го джерела i -ї речовини забруднення, яка виходить з деякого джерела, і від'ємна, якщо вона розчиняється (наприклад під впливом вітру). Математична модель процесу в багатокомпонентній суміші забрудненого повітря для стаціонарних умов має вигляд граничної задачі:

$$\frac{d}{dx} \left(D_L(x) \frac{d\bar{C}_i(x)}{dx} \right) - \frac{d}{dx} (u(x) \bar{C}(x)) + K(\bar{C}(x), x) + \vec{f}(x) = 0, \quad (2)$$

$$D_L(0) \frac{d\bar{C}_i(0)}{dx} = u(0) (\bar{C}(0) - \bar{C}_0), \quad (3)$$

$$D_L(L) \frac{d\bar{C}_i(L)}{dx} = 0, \quad (4)$$

де $\bar{C}(x) = (C_1(x), C_2(x), \dots, C_m(x))^T$; $u(x)$ – поздовжня швидкість матеріального потоку забруднення; $K(\bar{C}(x), x)$ – матриця, яка описує кінетику взаємодії між різними компонентами суміші; $\bar{C}_0 = (C_{10}, C_{20}, \dots, C_{m0})^T$; C_{i0} – величина концентрації i -ї компоненти забруднення в суміші на виході з джерела;

$$\vec{f}(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))^T; \quad f_i(x) = \sum_{k=1}^{p_i} q_{ik} \delta(x - x_{ik}),$$

p_i – число точкових джерел i -ї компоненти; L – довжина деякої поверхні.

Задача (2)-(4) в загальному випадку є нелінійною, несамоспряженою, що утруднює її інваріантне формулювання. З використанням концепції локального потенціалу [2] нами сформульована теорема, яка дозволяє представити її у варіаційній формі.

Теорема. Якщо функціонал, визначений виразом

$$\begin{aligned} I(\vec{C}(x)) = & \int_0^L \left\{ \frac{1}{2} D_L(x) \frac{d\vec{C}^T(x)}{dx} \frac{d\vec{C}(x)}{dx} + u(x) \vec{C}^T(x) \frac{d\vec{C}^0(x)}{dx} + \right. \\ & + \frac{1}{2} \vec{C}^T(x) \vec{C}(x) \frac{du(x)}{dx} - 2 \sum_{t=1}^m \int_0^{C_i(x)} \left(\sum_{j=0}^m K_{ij}(\vec{C}^0(x), x) \Big|_{\vec{C}^0(x)=t} \right) dt - \\ & \left. - \vec{f}^T(x) \vec{C}(x) \right\} dx + \frac{1}{2} u(0) \vec{C}^T(0) (\vec{C}(0) - 2\vec{C}_0), \end{aligned} \quad (5)$$

стаціонарний, а $\vec{C}_i^0(x)$ після варіації $I(\vec{C}(x))$ по $C_i(x)$ підлягають допоміжним умовам $C_i^0(x) \equiv C_i(x)$, то функції $C_i(x)$, $i = \overline{1, m}$ задовольняють систему рівнянь (2) і граничні умови (3)-(4).

Зауважимо, що гранична умова (4) (і (3) при $\vec{C}_0 = 0$) є природною для функціоналу (5), тобто її можна не задовольняти при побудові наближеного розв'язку.

Задачу мінімізації функціоналу (5) будемо розв'язувати методом скінченних елементів [4-6, 9-12]. Інтервал $[0, L]$ розіб'ємо на N частин послідовністю точок $\pi: x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_{N+1} = L$. Наближений розв'язок $\vec{C}_\pi(x)$ шукаємо у вигляді

$$C_{\pi i}(x) = \sum_{n=0}^{N+1} C_{in} h_n(x), \quad i = \overline{1, m}, \quad n = \overline{1, N+1}, \quad (6)$$

де C_{in} – величина концентрації i -ї компоненти забруднення в n -й точці розділення; функції $h_n(x)$ мають вигляд [3]

$$h_n(x) = \frac{1}{2} \left[\frac{|x - x_{n-1}|}{x_n - x_{n-1}} - \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{(x_n - x_{n-1})(x_{n+1} - x_n)} |x - x_n| + \frac{|x - x_{n+1}|}{x_{n+1} - x_n} \right]. \quad (7)$$

У результаті мінімізації $I(\vec{C}_\pi(x))$ по C_{in} розв'язання вихідної задачі зводиться до розв'язання системи рівнянь

$$\frac{\delta(\vec{C}_\pi(x))}{\delta C_{in}} = 0, \quad i = \overline{1, m}, \quad n = \overline{1, N+1}, \quad (8)$$

Для прикладу розглянемо граничну задачу (2)-(4) для двокомпонентної суміші (триоксиду сірки та оксиду вуглецю), яка описує процес розподілу забруднення повітря на деякій окремій поверхні, та здійснюється через окремі джерела забруднення.

На рис. 1. зображені результати застосування алгоритму. У розглянутому прикладі процес розпилення шкідливих сполук в повітрі з розподіленням концентрацій CO_2 (1 – експериментальні значення, 2 – розрахункові) і SO_3 (3 – експериментальні значення, 4 – розрахункові)

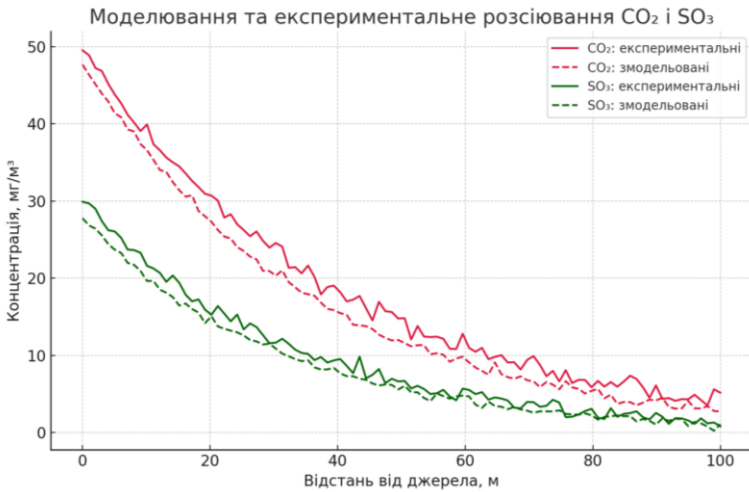


Рис. 1. Процес розподілу шкідливих сполук в повітрі

Здійснюваний у повітрі процес є послідовністю хімічних реакцій, кінетика яких описується наступною матрицею [6, 8], причому для CO_2 передбачається лише його дифузія без хімічних реакцій, а для SO_3 враховуються реакції з водяною парою та киснем (O_2):

$$K(\vec{C}(x), x) = \left\| \begin{array}{cc} -D_{CO_2} \Delta C_1(x) & \beta k_D C_2(x) \\ k_r \frac{C_2(x)}{K_m + C_2(x)} + k_D C_2(x) C_{H_2O} & -D_{SO_3} \Delta C_2(x) - k_D C_2(x) \\ + \lambda_{SO_3} C_2(x) C_{O_2} & \end{array} \right\|, \quad (9)$$

де $C_1(x)$ – концентрація забруднень вуглекислого газу CO_2 у повітрі на відстані x від джерела; $C_2(x)$ – концентрація забруднень триок-

сиду сірки SO_3 у повітрі на відстані x від джерела; k_r – максимально швидкість хімічної реакції SO_3 (наприклад, перетворення $SO_3 + H_2O \rightarrow H_2SO_4$) яка описується рівнянням Міхаеліса-Ментена [6, 14]; K_m – константа насичення (Міхаеліса) [6, 14] для SO_3 , яка визначає концентрацію, за якої швидкість реакції досягає половини від k_r ; k_D – швидкість гідратації або осадження SO_3 у зовнішньому середовищі (у присутності водяної пари); D_{CO_2} – коефіцієнт дифузії для CO_2 визначають швидкість просторового переносу забруднень у повітрі (наприклад, через турбулентність або молекулярну дифузію); β – феноменологічний коефіцієнт, який використовується для врахування впливу концентрації SO_3 на динаміку CO_2 (наприклад, при спільному транспортуванні чи вторинних ефектах у моделі); λ_{SO_3} – коефіцієнт взаємодії SO_3 з киснем (O_2) Феноменологічний параметр, що може моделювати вторинні окисні процеси або стабілізацію частинок в повітрі; C_{O_2} – концентрація кисню (Атмосферна константа, стабільна ≈ 0.21); C_{H_2O} – концентрація водяної пари (описує вологість повітря – умовно постійна величина).

Площа перерізу джерел викидів значно менша, ніж масштаб повітряного середовища де розпилюються викиди, тому їх можна розглядати як точкові джерела концентрації забруднень з інтенсивністю, яка визначається співвідношенням:

$$q_k = \frac{C_k \cdot A_k \cdot u}{A}, \text{ або } q_k = \frac{C_k \cdot Q_k}{A}, \text{ де } (Q_k = A_k \cdot u), \quad (10)$$

де C_k – концентрація забруднюючих речовин від k -го джерела в потоці труби (наприклад SO_3 або CO_2) у вихідному газі (мг/м^3); A_k – площа перерізу вихідного патрубка (м^2); u – швидкість повітряного потоку поблизу джерела (м/с); а q_k – інтенсивність викиду k -го джерела; та A – площа всієї області моделювання повітряного простору (м^2). Додавання A в рівняння дозволяє адекватно порівнювати внесок джерел у випадках, коли домен значно більший за самі джерела.

Фізично це відповідає миттєвому локалізованому викиду з труби в обмежену зону атмосфери.

З урахуванням наведеного вище, математична модель розповсюдження забруднень у повітряному середовищі від трубоподібних джерел (викидів) у стаціонарному режимі можна подати у вигляді наступної крайової задачі:

$$\frac{d}{dx} \left(D_{CO_2} \frac{dC_1}{dx} \right) - u \frac{dC_1}{dx} + \beta k_D C_2 + \sum_{k=1}^R q_{1k} \delta(x - x_k) = 0, \quad (11)$$

$$\frac{d}{dx} \left(D_{SO_3} \frac{dC_2}{dx} \right) - u \frac{dC_2}{dx} + R_{kin}(C_1, C_2) + \sum_{k=1}^R q_{2k} \delta(x - x_k) = 0, \quad (12)$$

$$R_{kin}(C_1, C_2) = \frac{k_r C_2}{K_m + C_2} + k_D C_2 + \kappa_{SO_3} C_2 C_{H_2O} + \lambda_{SO_3} C_2 C_{O_2}.$$

Граничні умови (умови Робіна) [16, 17]

$$\text{при } x = 0, \quad D_i \frac{dC_i}{dx} = u(C_i - C_i^0), \quad i = 1, 2 \quad (13)$$

$$\text{при } x = L_A, \quad \frac{dC_i}{dx} = 0, \quad i = 1, 2 \quad (14)$$

L – край повітряної області, що моделюється. Це означає, що на відстані $x = L_A$, градієнт концентрації дорівнює нулю, тобто немає витоку або додаткового потоку речовини далі за межі області – умова «натурального виходу», де D_{CO_2}, D_{SO_3} – коефіцієнти дифузії; C_{H_2O}, C_{O_2} – концентрація водяної пари і кисню у повітрі; $k_r, k_D, \lambda_{SO_3}, \kappa_{SO_3}, K_m$ – константи реакцій (хімічних взаємодій). Ця формула враховує що: кінетику перетворення SO_3 (термін з k_r); деструкцію (осідання) – $k_D C_2$; реакція з H_2O – утворення H_2SO_4 ; реакцію з CO_2 – додатковий синергетичний вплив; автоліз: $\beta k_D C_2$ – що генерує CO_2 – додаткове надходження CO_2 від розпаду SO_3 ; нелінійна реакція типу Міхаеліса-Ментена [6, 14]: $\frac{k_r C_2}{K_m + C_2}$, де x_k – координати труб (джерел викидів). u – швидкість повітряного потоку; k_r – швидкість реакції SO_3 (з утворенням H_2SO_4); K_m – насичуюча константа реакції.

У початковій області повітряного простору перед трубчастими джерелами може існувати фоновий рівень забруднюючих речовин, зокрема CO_2 , або нульовий рівень SO_3 . При надходженні потоку повітря в зону викидів відбувається інтенсивне локальне зростання концентрацій забруднювачів у результаті впливу точкових джерел (труб). Цей процес можна розглянути як миттєву зміну профілю концентрацій, яка виникає на вхідній межі області моделювання та має переважний ефект у початковий момент.

Фізично це відповідає граничному переходу від фонові (атмосферної) концентрації до зони локального забруднення, що забезпечується конвективним надходженням повітря з певним початковим складом.

У цьому контексті граничну умову при $x = 0$, можна записати у вигляді:

$$D_i \frac{dC_i}{dx} = u(C(0)_i - (1 - k_c)C_i^0), \quad i = 1, 2, \quad (15)$$

де C_i^0 – фонові концентрації SO_3 та CO_2 у повітрі (до викидів); $k_c \in [0, 1]$ – коефіцієнт, що описує частку фонові концентрації, яка зберігається в момент входу (наприклад, через турбулентне розсіювання або фонову вентиляцію); u – швидкість повітряного потоку; D_i – коефіцієнти дифузії відповідно для SO_3 та CO_2 .

Така інтерпретація дозволяє врахувати реалістичний вплив фонових умов на розподіл забруднень, і водночас зберігає узгодженість із варіаційною (FEM) схемою побудови моделі.

Варіаційна постановка задачі на основі локального потенціалу. Задача розповсюдження забруднювачів у повітрі від трубчатих точкових джерел описується системою диференціальних рівнянь з реакційними та «джерельними» (дельта) членами-функціями. У загальному вигляді вона є нелінійною та самоспряженою, що ускладнює її класичне формулювання. Для подолання цих труднощів використано концепцію локального потенціалу, запропоновану Глансдорфом і Пригожиным [18].

Формулюємо відповідний варіаційний функціонал:

(Це повністю відповідає формулюванню з концепції Глансдорфом-Пригожина про побудову потенціалу дисипативної системи)

$$J(C_1, C_2) = \int_0^L \left[D_{CO_2} \left(\frac{dC_1(x)}{dx} \right)^2 + D_{SO_3} \left(\frac{dC_2(x)}{dx} \right)^2 + R_{kin}(C_1, C_2) \right] dx + \sum_{k=1}^R \left(q_k^{(1)} C_1(x_k) + q_k^{(2)} C_2(x_k) \right), \quad (15)$$

$C_1(x), C_2(x)$ – концентрації SO_3 та CO_2 відповідно, D_{CO_2}, D_{SO_3} – коефіцієнти дифузії; x_k – координати труб (джерел). $q_k^{(i)}$ – інтенсивність викиду i -тої труби; R_{kin} – реакційний компонент:

$$R_{kin}(C_1, C_2) = \frac{k_r C_2}{K_m + C_2} + k_D C_2 + \kappa_{SO_3} C_2 C_{H_2O} + \lambda_{SO_3} C_2 C_{O_2} - \text{нелінійний}$$

реакційний компонент, що моделює поглинання триоксиду сірки водною парою та його взаємодію з оксидом вуглецю. Інтервал $[0, L]$ – поділяється на M скінчених елементів: $\pi = \{x_0 = 0 < x_1 < \dots < x_M = L\}$,

Концентрації функцій апроксимуються як:

$$C_{\pi 1}(x) \approx \sum_{m=0}^M C_{1,m} h_m(x), \quad C_{\pi 2}(x) \approx \sum_{m=0}^M C_{2,m} h_m(x)$$

$C_{i,m}$ – значення концентрації у вузлах $h_m(x)$ – кусочно-лінійні базисні функції (FEM), визначені як:

$$h_m(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{m-1}}{x_m - x_{m-1}}, & x \in [x_{m-1}, x_m]; \\ \frac{x_{m+1} - x}{x_{m+1} - x_m}, & x \in [x_m, x_{m+1}]; \\ 0, & \text{всі інші.} \end{cases}$$

Рішення варіаційної «краєвої» задачі (11) та (12)-(13) (14) або (15) зводиться до системи $2(M+1)$ нелінійних рівнянь щодо коефіцієнтів апроксимації $C_{1,m}, C_{2,m}$ яка розв'язується модифікованим методом Ньютона [2, 7, 10, 15] з регуляризацією та чисельним обчисленням похідних. Розберемо більш детально побудову системи рівнянь:

1. (Нелінійна стадія). мінімізація функціонала (13) (14) або (15) за коефіцієнтами $C_{1,m}, C_{2,m}$ приводить до системи нелінійних рівнянь розміру $2(M+1)$: $\vec{F}(\vec{C}) = 0$, $\vec{C} := [C_{10}, \dots, C_{1M}, C_{20}, \dots, C_{2M}]^T$

Кожне «слабке» інтегральне рівняння виводиться з варіаційної форми (як результат застосування принципу Рітца), інтегрованої по елементах, спочатку для C_1 :

$$\sum_{m=0}^M D_{CO_2} \int_0^L \frac{dC_1}{dx} \frac{dh_m}{dx} dx + \int_0^L \frac{\partial R_{kin}(C_1, C_2)}{\partial C_1} h_m(x) dx + \sum_k q_k^{(2)} h_m(x_k) = 0.$$

Але, якщо

$$\frac{\partial R_{kin}}{\partial C_1} = 0 \Rightarrow \int_0^L \frac{\partial R_{kin}(C_1, C_2)}{\partial C_1} h_m(x) dx = 0.$$

Отже, рівняння для CO_2 спрощується і набуває вигляду

$$\sum_{m=0}^M D_{CO_2} \int_0^L \frac{dC_1}{dx} \frac{dh_m}{dx} dx + \sum_k q_k^{(2)} h_m(x_k) = 0.$$

Тоді для C_2 (реакційний вплив враховано):

$$\sum_{m=0}^M D_{SO_3} \int_0^L \frac{dC_2}{dx} \frac{dh_m}{dx} dx + \int_0^L \frac{\partial R_{kin}(C_1, C_2)}{\partial C_2} h_m(x) dx + \sum_k q_k^{(2)} h_m(x_k) = 0$$

буде спрощено до

$$\sum_{m=0}^M D_{SO_3} \int_0^L \frac{dC_2}{dx} \frac{dh_m}{dx} dx + \int_0^L \left[\frac{k_r K_m}{(K_m + C_2)^2} + k_D + \kappa_{SO_3} C_{H_2O} + \lambda_{SO_3} \right] h_m(x) dx + \sum_k q_k^{(2)} h_m(x_k) = 0,$$

де похідна

$$\frac{\delta R_{kin}}{\delta C_2} = \frac{k_r K_m}{(K_m + C_2)^2} + k_D + \kappa_{SO_3} C_{H_2O} + \lambda_{SO_3},$$

а k – номери точкових джерел викидів. Цей вираз

$$\int_0^L h_m(x) \sum_k q_k^{(i)} \delta(x - x_k) dx = \sum_k q_k^{(i)} h_m(x_k)$$

обумовлює, що в кожній точці x_k джерело має інтенсивність $q_k^{(i)}$ – ідеальне точкове джерело.

Далі будуються матриці жорсткості $(M+1) \times (M+1)$ для кожного компоненту:

$$K_{m\ell}^{(i)} = \int_0^L D_i \frac{dh_m}{dx} \frac{dh_\ell}{dx} dx + \int_0^L \frac{\partial R_{kin}}{\partial C_i} h_m(x) h_\ell(x) dx, \text{ для } i = 1, 2.$$

Перший інтеграл – дифузійна складова, другий – реакційна похідна з локального потенціалу (Гласдорфа-Пригожина), де ℓ – номер стовпця (це другий індекс вузлової базисної функції), m – номер рядка. Тобто $K_{m\ell}^{(i)}$ – це елемент матриці жорсткості для компонента i , який відповідає взаємодії базисних функцій $h_m(x), h_\ell(x)$. Такий підхід дає симетричну і трідіагональну структуру матриці $K_i \in \mathbb{R}^{(M+1) \times (M+1)}$, це коректно з точки зору методу Галеркіна. Отже ФЕМ-система має вигляд:

$$K_1 \cdot \vec{C}_1 = \vec{f}_1, \quad K_2 \cdot \vec{C}_2 = \vec{f}_2,$$

де $\vec{f}_1, \vec{f}_2 \in \mathbb{R}^{M+1}$ – вектори, що включають точкові джерела викидів $q_k^{(i)} \cdot h_m(x_k)$ та граничні умови; $\vec{C}_1, \vec{C}_2$ – вектор значень концентрацій CO_2, SO_3 у вузлах.

Оскільки реакційний член $R_{kin}(C_1, C_2)$ нелінійний, задача приводиться до $2(M+1)$ системи рівнянь (ФЕМ) і розв'язується модифікованим методом Ньютона, із побудовою матриці Якобі чисельними похідними та застосуванням регуляризації:

$$\bar{C}^{(n+1)} = \bar{C}^{(n)} - J^{-1}(\bar{C}^{(n)}) \cdot \bar{F}(\bar{C}^{(n)}),$$

$$\text{де } J(:, i) = \frac{\bar{F}(\bar{C} + \varepsilon \bar{e}_i) - \bar{F}(\bar{C})}{\varepsilon}, \varepsilon \ll 1.$$

Для стабільності до діагоналі матриці J додається малий регулярний член $\delta \cdot I$, де $\delta \sim 10^{-8}$, а норма оновлення обмежується $\|\delta \bar{C}\| < \varepsilon, \varepsilon = 10^{-5}$. Тобто ітерації повторюються до досягнення бажаної точності. Поки норма не стане менше заданого порогу.

Для розв'язання системи рівнянь (8), яка внаслідок нелінійної матриці (9) є нелінійною, нами був використаний модифікований метод Ньютона. Складена програма на алгоритмічній мові MATLAB.

2. (Нелінійна стадія). На другому етапі будується апроксимація (дискретна форма похідної):

$$\frac{dC_1}{dx} \approx \sum_{m=0}^M \frac{C_{1m+1} - C_{1m}}{x_{m+1} - x_m}, \text{ та } \frac{dC_2}{dx} \approx \sum_{m=0}^M \frac{C_{2m+1} - C_{2m}}{x_{m+1} - x_m}.$$

Та вирішується методом Гаусса система $(M+1)$ лінійних рівнянь відносно невідомих $C_{3m}(m = \overline{0, M})$ (реалізовано на алгоритмічній мові MATLAB).

Оптимізація просторового розміщення джерел та реакційних коефіцієнтів.

Протягом розрахунків модифікованим методом Ньютона були отримані оптимальні значення реакційних коефіцієнтів для моделі кінетики SO_3 :

- $k_r = -2.0194$ (константа реакцій);
- $K_m = 0.1573$ (константа Міхаеліса-Ментен);
- $k_D = 0.0$ (константа деструкції).

Інтерпретація результатів:

- Значення $k_r = -2.0194$ вказує на зворотний або гальмівний вплив основної реакції при високих концентраціях. Від'ємне значення - це показник гальмування процесу розкладу або взаємодії SO_3 . Це часто трапляється у реальних умовах, коли утворюються проміжні або вторинні продукти, які тимчасово зв'язують SO_3 або уповільнюють його реакції.
- Низьке значення $K_m = 0.1573$ вказує, що реакція насичується при малих значеннях C_2 , тобто SO_3 .

- $k_D = 0.0$ свідчить про відсутність незалежного деструктивного (розпаду) впливу SO_3 – його деструкція відбувається лише у взаємодії з іншими компонентами або в присутності каталізаторів.

Оптимізація здійснюється шляхом мінімізації цільового функціонала, що розраховується за результатами FEM-розв'язку. Для цього використовуються стандартні алгоритми пошуку мінімуму (наприклад *fminsearch*, *fmincon*) у середовищі MATLAB.

Змодельована динамічна система показала, що за обсягу викидів $Q_1 = 200 \text{ м}^3/\text{г}$ (для CO_2) та $Q_2 = 150 \text{ м}^3/\text{г}$ (для SO_3) концентрація забруднення поблизу джерел досягає пікових значень. Розподіл забруднень узгоджується з даними про швидкість вітру та параметрами турбулентної дифузії.

Складена математична модель дозволяє оптимізувати розташування джерел x_k викидів а також оцінити ефективність заходів щодо скорочення викидів. А також забезпечити ефективне розсіювання забруднення та зменшення концентрацій у критичних ділянках. На додачу ця модель дозволяє включити процедуру оптимізації щоб визначити оптимальні коефіцієнти реакцій (k_r, K_m, k_D), для мінімізації сумарного функціоналу $J(C_1, C_2)$ (15).

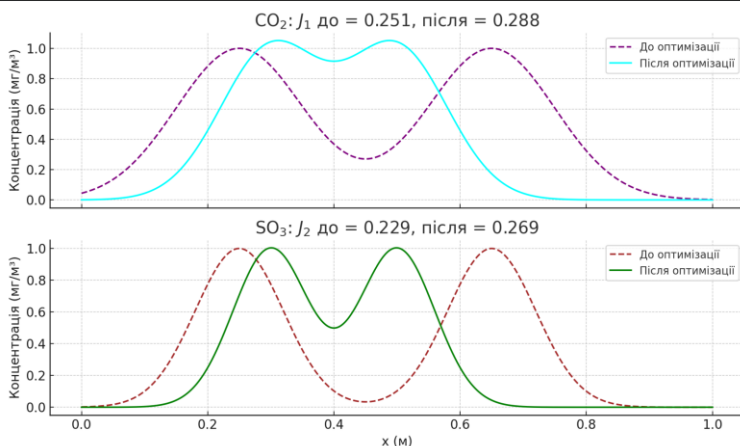


Рис. 2. Показано профілі концентрації CO_2, SO_3
до і після оптимізації розміщення джерел.

Також відображення значення функціоналів J_1 та J_2

Наприклад, на цьому графіку зображено ефект оптимізації положень джерел викиду.

Верхній графік (CO_2):

- синя пунктирна лінія – розподіл концентрації $C_1(x)$ до оптимізації;
- синя суцільна лінія – розподіл після оптимізації;
- червоні вертикальні лінії – старі положення джерел;
- зелені вертикальні лінії – нові (оптимізовані) положення.

Нижній графік (SO_3):

- Аналогічно: помаранчеві лінії для $C_2(x)$, що показують розсіювання (SO_3) до та після оптимізації.

Де вісь x – це просторова координата вздовж області моделювання (наприклад довжина ділянки землі), в метрах (м) вісь y – концентрація речовин в повітрі (CO_2, SO_3) у mg/m^3 .

Висновок. Дослідження вперше використовує концепцію локального потенціалу для формулювання та розв'язання граничної задачі, що описує процеси переносу багатокомпонентної суміші забруднень у повітрі за наявності точкових джерел деякої речовини. Важливо відзначити, що обране використання методу скінчених елементів (МСЕ) у поєднанні з концепцією локального потенціалу надає цілісний та ефективний підхід для аналітичного моделювання даного процесу.

Список використаних джерел:

1. Strang G., Fix G. J. An Analysis of the Finite Element Method. 2nd ed. Wellesley-Cambridge Press, 2008.
2. Quarteroni A., Valli A. Numerical Approximation of Partial Differential Equations. Springer, 1994.
3. Sun C., Gao Y., Liu H., Zhang W. A finite element method for simulating air-pollutant dispersion in urban areas. *Environmental Modelling & Software*. 2020. Vol. 134. Article 104814.
4. Zienkiewicz O. C., Taylor R. L. The Finite Element Method for Fluid Dynamics. 6th ed. Elsevier, 2013.
5. Schechter R. S. The Variational Method in Engineering. 1st ed. New York: McGraw-Hill, 1967.
6. Glansdorff P., Prigogine I. Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations. New York: Wiley-Interscience, 1971.
7. Cussler E. L. Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems. 4th ed. Cambridge University Press, 2022. ISBN 978-0-521-29846-9
8. Дубенець В. Г., Хільчевський В. В., Савченко О. В. Основи методу скінчених елементів: підручник. 2-е вид., переробл. Чернівці: ЧДТУ, 2007.
9. Atkins P., de Paula J., Keeler J. Physical Chemistry. 12th ed. Oxford University Press, 2022. ISBN 978-0198847816
10. Malcata F. X. Mathematics for Enzyme Reaction Kinetics and Reactor Performance. Wiley, 2020. URL: <https://doi.org/10.1002/9781119490319>.

11. Shubin M. Invitation to Partial Differential Equations. AMS, Graduate Studies in Mathematics. 2020. ISBN 978-1-4704-6496-7
12. Chaari A., Mouhali W., Sellila N., та ін. Pollutant dispersion dynamics under horizontal wind shear conditions: insights from bidimensional traffic flow models. *Fluids*. 2024. Vol. 9 (11). Article 265. URL: <https://doi.org/10.3390/fluids9110265>.
13. Ern A., Guermond J.-L. Finite Elements I: Approximation and Interpolation. Springer, Texts in Applied Mathematics, 2021. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-56341-7>.
14. Copeland R. A. Enzymes: A Practical Introduction to Structure, Mechanism, and Data Analysis. 3rd ed. Wiley, 2023. URL: <https://doi.org/10.1002/9781119793250>.
15. Riestra J. A. A Generalized Taylor's Formula for Functions of Several Variables and Certain of Its Applications. CRC Press, 2020. URL: <https://doi.org/10.1201/9780429333033>.
16. Möller D. Atmospheric Chemistry: A Critical Voyage Through the History. De Gruyter, 2022. URL: <https://doi.org/10.1515/9783110732467>.
17. Hou J., Yan W., Hu D., He Z. Robin–Robin domain decomposition methods for the dual-porosity–conduit system. *Advances in Computational Mathematics*. 2021. Vol. 47 (1). P. 1–33. URL: <https://doi.org/10.1007/s10915-021-01674-x>.
18. Abd A. S., Abushaikh A. S. Reactive transport in porous media: a review of recent mathematical efforts in modeling geochemical reactions in petroleum subsurface reservoirs. *SN Applied Sciences*. 2021. Vol. 3. Article 401. URL: <https://doi.org/10.1007/s42452-021-04396-9>.

MATHEMATICAL MODELING OF POLLUTANT DISPERSION IN THE AIR FROM INDUSTRIAL EMISSIONS

A boundary problem is formulated to describe the processes of multi-component pollutant transport in the air in the presence of point sources. Using the concept of local potential, a theorem is developed that enables the construction of an algorithm for solving the problem via the finite element method (FEM). The choice of FEM is justified by its key advantages: (1) FEM provides an approximate solution in the form of an analytical expression; (2) it formalizes the procedure for satisfying boundary conditions by selecting a functional where one or both boundary conditions are natural; (3) it allows for constructing an approximation even in cases with discontinuous coefficients or when the non-homogeneous term of the differential operator includes a sum of Dirac delta functions.

Furthermore, an algorithm is developed for solving a nonlinear boundary value problem with variable coefficients, featuring a singularity represented as a sum of unit Dirac delta functions. The mathematical model of pollutant dispersion above a given surface considers the effect of initial dispersion of polluted air and is formulated as a two-point boundary value problem for a system of differential equations governing the material balance of organic pollutants in the air.

The mathematical model formulated in this work describes the process of polluted airflows around an emission source located on a surface, leading to a nonlinear boundary value problem. The solution is obtained using FEM, which enables the construction of variable approximations in the presence of singularities such as Dirac delta functions. The variational formulation of the boundary

problem is developed using the Ritz method, incorporating the local potential concept proposed by Glansdorff and Prigogine.

Key words: *Multi-component pollutant transport, finite element method (FEM), boundary value problem, Dirac delta function, air purification modeling, pollutant dispersion, nonlinear differential equations, Ritz method, local potential, modified Newton's method, Gauss method, kinetic constant estimation.*

Отримано: 9.06.2025

УДК 519.856.330.43

DOI: 10.32626/2308-5878.2025-27.68-74

О. І. Радзівська*, канд. фіз.-мат. наук,

І. Б. Ковальська**, канд. фіз.-мат. наук

*Національний університет харчових технологій, м. Київ,

** Кам'янець-Подільський національний університет
імені Івана Огієнка, м. Кам'янець-Подільський

ЗАСТОСУВАННЯ БАЙЄСІВСЬКОГО МЕТОДУ В МОДЕЛЮВАННІ ЕКОНОМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

У сучасному світі дані є одним з найважливіших ресурсів. Здатність ефективно аналізувати їх та робити обґрунтовані висновки стає ключовою. Байєсівські методи, основою яких є теорема Байєса, пропонують потужний та гнучкий інструмент для розв'язання складних проблем, дозволяючи оновлювати початкові уявлення в світлі нових доказів. Методи спираються на поняття апостеріорної ймовірності та використання формули Байєса, а ймовірність Байєса розглядається, як ступінь впевненості у відповідній події.

Теорема Байєса, по суті, є формалізацією того, як можна вчитися на досвіді. Вона надає математичний апарат для об'єднання попередніх знань (або «априорних» переконань) з даними, отриманими з реального світу, для формування більш точних і надійних «апостеріорних» висновків. Це робить байєсівські методи особливо цінними в сферах, де невизначеність є невід'ємною частиною процесу, а також там, де потрібно приймати рішення в умовах обмеженої інформації.

У статті з допомогою теореми Байєса моделюється апостеріорна функція щільності розподілу ймовірностей деякого параметра – невідомого математичного сподівання (наприклад, середнього відсотку зростання прибутку домогосподарств в даній місцевості). Нехай з попередніх досліджень відомий середній відсоток зростання прибутку. Якщо випадковим чином отримати вибірку з n домогосподарств, тобто випадкову вибірку x з генеральної сукупності, яка, припустимо, має нормальний розподіл з невідомим математичним сподіванням і відомою дисперсією, то можна знайти апостеріорну функцію