

УДК 502.3:504.5:629.33

Н. Н. БЕЛЯЕВ^{1*}, Е. С. СЛАВИНСКАЯ^{2*}, Р. В. КИРИЧЕНКО^{3*}

^{1*}Каф. «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, Днипро, Украина, 49010, тел. +38 (056) 273 15 09, эл. почта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

^{2*}Каф. «Управление производством и имуществом», Национальный транспортный университет, ул. Суворова, 1, Киев, Украина, 01010, тел. +38 (044) 280 82 03, эл. почта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-5163-5645

^{3*}Каф. «Управление производством и имуществом», Национальный транспортный университет, ул. Суворова, 1, Киев, Украина, 01010, тел. +38 (044) 280 82 03, эл. почта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-9918-3895

ПРОГНОЗ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ВЫБРОСАМИ АВТОТРАНСПОРТА С УЧЕТОМ ХИМИЧЕСКОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ

Цель. Научная работа предполагает разработку 3D-численных моделей, которые позволят рассчитывать процесс загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта с учетом химической трансформации вредных веществ. Также необходимо рассмотреть создание численных моделей, которые давали бы возможность прогнозировать уровень загрязнения атмосферного воздуха в условиях городской застройки.

Методика. Для решения задачи по оценке уровня загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта задействованы уравнения аэродинамики и массопереноса. Для решения дифференциальных уравнений аэродинамики и массопереноса используются конечно-разностные методы. Для численного интегрирования уравнения потенциала скорости применяется метод условной аппроксимации. Уравнение для потенциала скорости, записанное в разностном виде, разделяется на два уравнения, причем на каждом шаге разделения неизвестное значение потенциала скорости определяется по явной схеме бегущего счета, при этом сама разностная схема – неявная. Для численного интегрирования уравнения рассеивания выбросов в атмосфере применяется неявная попеременно-треугольная разностная схема расщепления. Выбросы от автотрассы моделируются серией точечных источников заданной интенсивности. Разработанные численные модели составляют основу созданного пакета прикладных программ.

Результаты. Авторами созданы 3D-численные модели, которые относятся к классу «diagnostic models». Данные модели учитывают основные физические факторы, влияющие на процесс рассеивания вредных веществ в атмосфере при выбросах от автотранспорта с учетом химической трансформации вредных веществ. На основе построенных численных моделей проведен вычислительный эксперимент по оценке уровня загрязнения воздушной среды на улице. **Научная новизна.** Разработаны численные модели, которые позволяют рассчитать 3D аэродинамику ветрового потока в условиях городской застройки и процесс массопереноса выбросов от автотрассы. Модели позволяют учитывать химическую трансформацию выбросов в атмосфере. Выполнены расчеты по определению зоны загрязнения, которая формируется возле зданий, расположенных вдоль автомагистрали. **Практическая значимость.** Рассмотрены эффективные численные модели, которые могут быть применены при разработке мероприятий по охране окружающей среды при эксплуатации автомобильного транспорта в городе. Разработанные модели позволяют оценить размеры, форму и интенсивность зоны загрязнения возле автомагистрали.

Ключевые слова: загрязнение атмосферы; автотранспорт; численное моделирование; химическая трансформация вредных веществ

Введение

Известно, что автотранспорт является крупнейшим источником загрязнения атмосферного воздуха. Кроме этого, в мире наблюдается стремительная тенденция роста количества автомобилей в различных странах. По этой причине значительно усилился интерес к разработ-

ке теоретических методов оценки влияния автотранспорта на загрязнение воздушной среды в городах (рис. 1) [1–3, 6, 8–10]. Применение таких методов имеет определенное преимущество перед методом физического моделирования, который требует больших материальных затрат и времени на организацию и проведение

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

експеримента, як в лабораторних, так и в природних умовах.

При використанні методу математичного моделювання найбільше часто застосовуються емпіричні та аналітичні моделі [1]. Дані моделі дозволяють оперативно отримувати дані про можливі рівні забруднення атмосферного повітря. Однак, суттєвим їхнім недоліком є те, що при отриманні прогнозних оцінок не враховуються наявні будівлі.



Рис. 1. Выбросы от автотранспорта

Fig. 1. Emissions from motor vehicles

В цій зв'язі спостерігається підвищений інтерес до створення чисельних моделей для дослідження процесів забруднення атмосферного повітря викидами автотранспорту, які враховували б усі фактори [1, 2]. Слід підкреслити, що в Україні спостерігається обмежене число наукових розробок у даному напрямку.

Цель

Ціллю даної роботи є створення 3D CFD моделей для прогнозу рівня забруднення атмосферного повітря викидами автотранспорту в умовах забудови. Ставиться завдання створення моделей, які дозволяють враховувати хімічну трансформацію викидів в атмосфері.

Методика

Для розв'язання задачі про прогнозу рівня забруднення атмосферного повітря в умовах забудови викидами автотранспорту будуть використані фундаментальні рівняння аеродинаміки та масопереносу. Для чисельно-

го інтегрування моделюючих рівнянь будуть застосовуватися кінечно-різнісні методи.

Математическая модель

Модель аеродинаміки. Так як ставиться завдання розробки математичної моделі для прогнозу рівня забруднення атмосферного повітря в умовах забудови, то для розв'язання такої задачі необхідно визначити поле швидкості вітрового потоку при наявності будівлі. Для розв'язання цієї задачі будемо застосовувати модель безвихревого течія ідеальної рідини [5]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = 0, \quad (1)$$

де φ – потенціал швидкості.

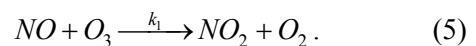
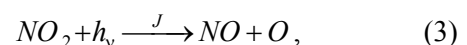
Компоненти вектора швидкості повітряного потоку визначаються такими співвідношеннями:

$$u = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad w = \frac{\partial \varphi}{\partial z}. \quad (2)$$

Постановка граничних умов для даного рівняння розглядається в роботах [1, 5]. Відзначимо, що розв'язання рівняння (1) здійснюється в умовах забудови.

Компоненти вектора швидкості повітряного потоку, визначені після розв'язання аеродинамічної задачі, використовуються далі для розв'язання задачі масопереносу шкідливих речовин (викиди автотранспорту) на вулицях.

Модель масопереносу. Як відомо, викиди автотранспорту містять велику кількість шкідливих речовин. Під дією сонячного світла між органічними речовинами, що поступають з відпрацьованими газами автотранспорту та оксидами азоту, відбувається фотохімічна реакція і утворюється так званий фотохімічний смог. Основними реакціями при цьому є [9, 10]:



ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением процесса переноса химического превращения окиси азота и двуокиси азота в атмосфере на улице. Выбор только этих загрязняющих веществ связан также с тем, что для расчета химической трансформации выбросов в атмосферу необходимо знать скорости химических реакций. В литературе существует определенная информация относительно этого параметра для указанных веществ.

Решение задачи о прогнозе загрязнения атмосферного воздуха выбросами от автотранспорта будет осуществляться в два этапа. На первом этапе решения будет моделировать процесс переноса указанных веществ в атмосфере с учетом рассеивания озона. На этом этапе используются следующие уравнения:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial[NO]}{\partial t} + \frac{\partial u[NO]}{\partial x} + \frac{\partial v[NO]}{\partial y} + \frac{\partial w[NO]}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial[NO]}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial[NO]}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial[NO]}{\partial z}) + \\ & + Q_{NO} \delta(x-x_0) \delta(y-y_0) \delta(z-z_0), \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial[NO_2]}{\partial t} + \frac{\partial u[NO_2]}{\partial x} + \frac{\partial v[NO_2]}{\partial y} + \frac{\partial w[NO_2]}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial[NO_2]}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial[NO_2]}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial[NO_2]}{\partial z}) + \\ & + Q_{NO_2} \delta(x-x_0) \delta(y-y_0) \delta(z-z_0), \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial[O_3]}{\partial t} + \frac{\partial u[O_3]}{\partial x} + \frac{\partial v[O_3]}{\partial y} + \frac{\partial w[O_3]}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial[O_3]}{\partial x}) + \\ & + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial[O_3]}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial[O_3]}{\partial z}). \quad (8) \end{aligned}$$

где Q_{NO} – интенсивность выброса NO от автомобилей, Q_{NO_2} – интенсивность выброса NO_2 от автомобилей; u, v, w – компоненты вектора скорости ветра; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ – коэффициенты атмосферной турбулентной диффузии; x_0, y_0, z_0 – координаты источника выброса загряз-

няющего вещества; $\delta(x-x_0), \delta(y-y_0), \delta(z-z_0)$ – дельта-функция Дирака, с помощью которой моделируется выброс загрязнителя.

Эмиссия загрязняющих веществ от автотранспорта моделируется серией точечных источников, заданной интенсивности Q_{NO}, Q_{NO_2} и расположенных вдоль магистрали.

Постановка граничных и начальных условий для уравнения массопереноса рассмотрена в работах [1, 5].

На входе в расчетную область задаются следующие значения параметров [1, 7]:

$$\begin{aligned} u &= u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^p, \mu_z = k_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m, \\ \mu_x &= k_0 u, \mu_x = \mu_y, \end{aligned}$$

где u_1 – скорость ветра на высоте z_1 (принимается $z_1 \approx 10 \text{ м}$); $k_1 = 0,2$; $k_0 = 0,1$; $p = 0,16$; $m \approx 1$.

На втором этапе решения задачи массопереноса осуществляется расчет химической трансформации веществ в атмосфере с использованием таких зависимостей [8–10]:

$$\frac{d[NO]}{dt} = -k_1 [NO][O_3] + J[NO_2]; \quad (9)$$

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = k_1 [NO][O_3] - J[NO_2]; \quad (10)$$

$$\frac{d[O_3]}{dt} = -k_1 [NO][O_3] + J[NO_2]. \quad (11)$$

Решение данных уравнений проводится методом Эйлера.

Известно, что выброс NO_2 составляет величину порядка 5 % от выброса NO_x , а остальная часть выброса, порядка 95 %, – это выброс NO . Для расчета процесса химической трансформации в работе принято, что скорость химических реакций составляет: $J = 0,0045 \text{ с}^{-1}$, $k_1 = 0,00039 \text{ ppb}^{-1} \text{ с}^{-1}$.

Для формирования вида расчетной области используются маркеры [1, 2]. С помощью маркеров в дискретной модели задается положение

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

автомагістралі, інтенсивність вибросов от автомобилей и положение зданий в расчетной области. Это позволяет очень быстро формировать «геометрию» расчетной области, т.е. положение зданий, их форму, положение автомагистралей и т. д.

Метод решения. Для решения дифференциальных уравнений аэродинамики и массопереноса используются конечно-разностные методы. Так, при численном интегрировании уравнения, для потенциала скорости применяется метод условной аппроксимации [4] Уравнение для потенциала скорости записывается в виде:

$$\frac{\partial P}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}, \quad (12)$$

здесь η – фиктивное время.

При $\eta \rightarrow \infty$ решение уравнения (12) будет стремиться к «установлению», т.е. к решению уравнения (1).

Разностные уравнения для численного решения (12) на каждом дробном шаге расщепления имеют вид [4]:

$$\begin{aligned} \frac{P_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - P_{i,j,k}^n}{\Delta t} &= \left[\frac{-P_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i-1,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} \right] + \\ &+ \left[\frac{-P_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i,j,k-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} \right] + \left[\frac{-P_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} \right], \\ \frac{P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \left[\frac{P_{i+1,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] + \\ &+ \left[\frac{P_{i,j,k+1}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y^2} \right] + \left[\frac{P_{i,j,k+1}^{n+1} - P_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z^2} \right]. \end{aligned}$$

На каждом шаге расщепления расчет неизвестной величины потенциала скорости идет по явной формуле – методу бегущего счета.

Перед началом численного интегрирования уравнения (4) задается поле потенциала скорости для «начального» момента фиктивного времени. Процесс расчета поля потенциала

скорости заканчивается при выполнении условия:

$$\left| P_{i,j,k}^{n+1} - P_{i,j,k}^n \right| \leq \varepsilon,$$

где $P_{i,j,k}^{n+1}$ – новое приближение величины потенциала скорости; $P_{i,j,k}^n$ – предыдущее значение величины потенциала скорости; ε – малое число.

После расчета поля потенциала скорости осуществляется расчет компонент вектора скорости воздушного потока на гранях разностных ячеек по зависимостям:

$$\begin{aligned} u_{ijk} &= \frac{P_{i,j,k} - P_{i-1,j,k}}{\Delta x}, \\ v_{ijk} &= \frac{P_{i,j,k} - P_{i,j-1,k}}{\Delta y}, \\ w_{ijk} &= \frac{P_{i,j,k} - P_{i,j,k-1}}{\Delta z}. \end{aligned}$$

После решения задачи аэродинамики – определения поля скорости воздушного потока решается задача массопереноса загрязняющих веществ от автомагистрали. Для численного интегрирования уравнений (6)–(8) используется попеременно-треугольная разностная схема [1, 5]. Построение этой разностной схемы осуществляется путем расщепления решения исходного уравнения массопереноса (6)–(8) на последовательность разностных уравнений более простой структуры, из которых неизвестное значение концентрации примеси определяется методом бегущего счета.

Результаты

Ниже представлены результаты решения задачи по оценке уровня загрязнения атмосферного воздуха вблизи двух зданий. Рядом со зданиями планируется строительство автомагистрали (рис. 2). Как видно из рис. 2 автомагистраль огибает первое здание (позиция 1), которое имеет Г-образную форму. Интенсивность эмиссии от автомагистрали задается с помощью дельта-функции Дирака, т. е. набором точечных источников эмиссии, расположенных по трассе автомагистрали. Ставилась задача

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

оценки размеров, формы зоны загрязнения возле автомагистрали.

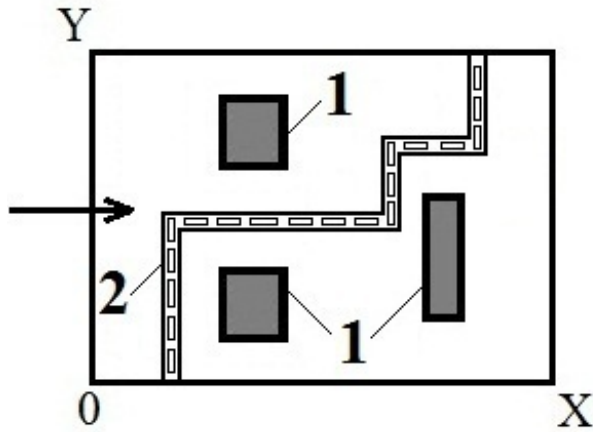


Рис. 2. Расчетная схема:
1 – здания, 2 – автомагистраль

Fig. 2. Sketch of computational region:
1 – buildings, 2 – highway

На рис. 3 показана зона загрязнения на уровне $z = 3$ м. Из этого рисунка хорошо видно, что первое здание полностью попадает в зону влияния автомагистрали. Между зданиями формируется подзона с большим градиентом концентрации примеси.

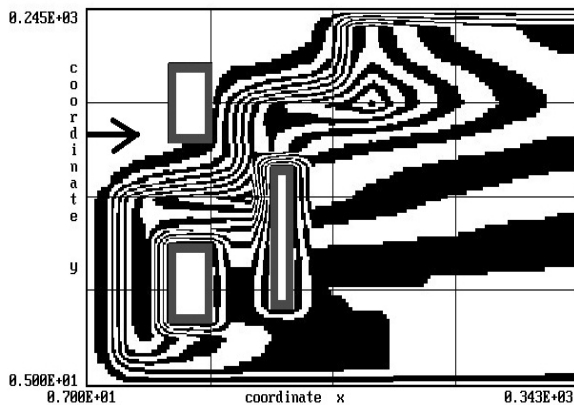


Рис. 3. Зона загрязнения (NO_2) возле зданий
(уровень $z = 3$ м)

Fig. 3. Pollution area (NO_2) near buildings
(level $z = 3$ m)

Отметим, что на решение задачи потребовалось около 10 с компьютерного времени.

Научная новизна и практическая значимость

Созданы 3D численные модели, позволяющие рассчитывать формирование зон загрязнений в условиях застройки при эмиссии вредных веществ от автотранспорта с учетом химической трансформации этих выбросов в атмосферу. Представленные 3D численные модели основаны на применении фундаментальных уравнений аэродинамики и массопереноса.

Особенностью разработанных моделей является использование стандартной метеорологической информации, быстрота в получении расчетных данных и удобство анализа получаемых результатов прогноза.

Выводы

Предложены численные 3D модели для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха выбросами от автотранспорта. Численные модели предполагают прогнозирование уровня загрязнения атмосферного воздуха в условиях застройки с учетом химической трансформации выбросов в атмосфере. Решение аэродинамической задачи по определению поля скорости воздушного потока, при наличии зданий, основывается на численном интегрировании уравнения для потенциала скорости. Прогноз уровня загрязнения атмосферного воздуха осуществляется на базе уравнений массопереноса, записанных для каждого конкретного загрязняющего вещества. Применяемые уравнения массопереноса учитывают конвективный и диффузионный перенос загрязняющих веществ в атмосфере с учетом застройки. Выбросы от автотрассы моделируются серией точечных источников, которые задаются с помощью дельта-функции Дирака. Предложенные модели дают возможность оперативно получить информацию об уровне загрязнения атмосферного воздуха в районах, где проходят автомагистрали.

Дальнейшее совершенствование моделей следует проводить в направлении создания численной модели, учитывающей образование вихрей в воздушном потоке.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Беляев, Н. Н. Моделирование загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта на улицах городов : монография / Н. Н. Беляев, Т. И. Русакова, П. С. Кириченко. – Днепропетровск : Акцент ПП, 2014. – 159 с.
2. Беляев, Н. Н. CFD прогнозирование процесса загрязнения воздушной среды на улицах / Н. Н. Беляев, Т. И. Русакова // *Екологія і природокористування* : зб. наук. пр. / Ін-т проблем природокористування та екології НАН України. – Київ, 2013. – Вип. 17. – С. 188–194.
3. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г. И. Марчук. – Москва : Наука, 1982. – 320 с.
4. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – Москва : Наука, 1983. – 616 с.
5. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – Київ : Наук. думка, 1997. – 368 с.
6. A new simplified NO/NO₂ conversion model under consideration of direct NO₂-emissions / I. During, W. Bachlin, M. Ketzler [et al.] // *Meteorologische Zeitschrift*. – 2011. – Vol. 20, No. 1. – P. 67–73. doi: 10.1127/0941-2948/2011/0491.
7. Berlov, O. V. Atmosphere protection in case of emergency during transportation of dangerous cargo / O. V. Berlov // *Наука та прогрес транспорту*. – 2016. – № 1 (61). – С. 48–54. doi: 10.15802/stp2016/60953.
8. Numerical simulations and wind tunnel studies of pollutant dispersion in the urban street canyons with different height arrangements / C.-H. Chang, J.-S. Lin, C.-M. Cheng, Y.-S. Hong // *J. of Marine Science and Technology*. – 2013. – Vol. 21, No. 2. – P. 119–126.
9. Overman, H. T. Simulation model for NO_x distributions in a streey canyon with air purifying pavement : master thesis / H. T. Overman ; University of Twente. – Enschede, Netherlands, 2009. – 69 p.
10. Trong, N. N. Numerical simulation of wind flow and pollution transport in urban street canyons / N. N. Trong, C. N. Thanh, T. N. Van // *Advanced science and technology letters*. – 2015. – Vol. 120. – P. 770–777. doi: 10.14257/astl.2015.120.152.

М. М. БІЛЯЄВ^{1*}, О. С. СЛАВІНСЬКА^{2*}, Р. В. КИРИЧЕНКО^{3*}

^{1*}Каф. «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, Дніпро, Україна, 49010, тел. +38 (056) 273 15 09, ел. пошта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

^{2*}Каф. «Управління виробництвом та майном», Національний транспортний університет, вул. Суворова, 1, Київ, Україна, 01010, тел. +38 (044) 280 82 03, ел. пошта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-5163-5645

^{3*}Каф. «Управління виробництвом та майном», Національний транспортний університет, вул. Суворова, 1, Київ, Україна, 01010, тел. +38 (044) 280 82 03, ел. пошта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-9918-3895

ПРОГНОЗ ЗАБРУДНЕННЯ АТМОСФЕРНОГО ПОВІТРЯ ВИКИДАМИ АВТОТРАНСПОРТУ З УРАХУВАННЯМ ХІМІЧНОЇ ТРАНСФОРМАЦІЇ ШКІДЛИВИХ РЕЧОВИН

Мета. Наукова робота передбачає розробку 3D чисельних моделей, які дозволять розраховувати процес забруднення атмосферного повітря викидами автотранспорту з урахуванням хімічної трансформації шкідливих речовин. Також необхідно розглянути створення чисельних моделей, які давали б можливість прогнозувати рівень забруднення атмосферного повітря в умовах міської забудови. **Методика.** Для вирішення задачі по оцінці рівня забруднення атмосферного повітря викидами автотранспорту використовуються рівняння аеродинаміки та масопереносу. Для вирішення диференціальних рівнянь аеродинаміки та масопереносу задіяні кінцево-різницеві методи. Для чисельного інтегрування рівняння потенціалу швидкості застосовується метод умовної апроксимації. Рівняння для потенціалу швидкості, записане в різницевому вигляді, розділяються на два рівняння, причому на кожному кроці розділення невідоме значення потенціалу швидкості визначається за явною схемою біжучого рахунку, при цьому сама різницева схема – неявна. Для чисельного інтегрування рівняння розсіювання викидів в атмосфері застосовується неявна поперемінно-трикутна різницева схема розщеплення. Викиди від автотраси моделюються серією точ-

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

кових джерел заданої інтенсивності. Розроблені чисельні моделі складають основу створеного пакета прикладних програм. **Результати.** Авторами створені 3D чисельні моделі, які відносяться до класу «diagnostic models». Дані моделі враховують основні фізичні фактори, що впливають на процес розсіювання шкідливих речовин в атмосфері при викидах від автотранспорту з урахуванням хімічної трансформації шкідливих речовин. На основі побудованих чисельних моделей проведено обчислювальний експеримент по оцінці рівня забруднення повітряного середовища на вулиці. **Наукова новизна.** Розроблено чисельні моделі, які дозволяють розрахувати 3D аеродинаміку вітрового потоку в умовах міської забудови та процес масопереносу викидів від автотраси. Моделі дозволяють враховувати хімічну трансформацію викидів в атмосфері. Виконано розрахунки по визначенню зони забруднення, яка формується біля будівель, розташованих вздовж автомагістралі. **Практична значимість.** Розглянуто ефективні чисельні моделі, які можуть бути застосовані при розробці заходів із охорони навколишнього середовища при експлуатації автомобільного транспорту в місті. Розроблені моделі дозволяють оцінити розміри, форму та інтенсивність зони забруднення біля автомагістралі.

Ключові слова: забруднення атмосфери; автотранспорт; чисельне моделювання, хімічна трансформація шкідливих речовин

M. M. BILIAIEV^{1*}, O. S. SLAVINSKA^{2*}, R. V. KYRYCHENKO^{3*}

^{1*}Dep. «Hydraulics and Water Supply», Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, Lazaryan St., 2, Dnipro, Ukraine, 49010, tel. +38 (056) 273 15 09, e-mail gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

^{2*}Dep. «Manufacturing and Property Management», National Transport University of Ukraine, Suvorov St., 1, Kyiv, Ukraine, 01010, tel. +38 (044) 280 82 03, e-mail gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-5163-5645

^{3*}Dep. «Manufacturing and property management», National Transport University of Ukraine, Suvorov St., 1, Kyiv, Ukraine, 01010, tel. +38 (044) 280 82 03, e-mail gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-9918-3895

PREDICTION OF ATMOSPHERIC AIR POLLUTION BY EMISSIONS OF MOTOR TRANSPORT TAKING INTO ACCOUNT THE CHEMICAL TRANSFORMATION OF HARMFUL SUBSTANCES

Purpose. Development of 3D numerical models, which allow us to calculate air pollution process from road transport emissions based on chemical transformation of pollutants. Creating numerical models, which would give the opportunity to predict the level of air pollution in urban areas. **Methodology.** To address the evaluation of the air pollution problem of emissions of vehicles the equations of aerodynamics and mass transfer were used. In order to solve differential equations of aerodynamics and mass transfer the finite difference methods are used. For the numerical integration of the equation for the velocity potential the method of conditional approximation was applied. The equation for the velocity potential written in difference form, is being split into two equations, and at each step of splitting the unknown value of the potential speed is determined by the explicit scheme of running account and the difference scheme itself is implicit. For the numerical integration of the equation of dispersion of emissions in the atmosphere is used implicit alternating-triangular difference splitting scheme. Emissions from the road are simulated by a series of point sources of a given intensity. The developed numerical models are the basis of established software package. **Findings.** There were developed 3D numerical models, which belong to the class «diagnostic models». These models take into account the main physical factors affecting the process of dispersion of pollutants in the atmosphere when emissions from road transport taking into account the chemical transformation of pollutants. On the basis of the constructed numerical models a computational experiment to assess the level of air pollution in the street was carried out. **Originality.** Numerical models that allow you to calculate the 3D aerodynamic of wind flow in urban areas and the process of mass transfer of emissions from the road were developed. The models make it possible to account the chemical transformation of emissions in the atmosphere. There were performed the calculations to determine the contamination zone that formed near the buildings along the motorway. **Practical value.** There were considered efficient numerical models that can be used in the development of environmental protection measures in the operation of road transport in the city. The developed models allow us to estimate the size, shape and intensity of the contamination zone near the motorway.

Keywords: air pollution; vehicles; numerical modeling; chemical transformation of pollutants

REFERENCES

1. Biliaiev, M. M., Rusakova, T. I., & Kirichenko, P. S. (2014). *Modelirovaniye zagryazneniya atmosfernogo vozduha vybrosami avtotransporta na ulicah gorodov* [Monograph]. Dnipropetrovsk: Aktsent PP.
2. Biliaiev, M. M., & Rusakova, T. I. (2013). CFD prediction of air pollution in the streets. *Ecology and Nature Management*, 17, 188-194.
3. Marchuk, G. I. (1982). *Matematicheskoye modelirovaniye v probleme okruzhayushchey sredy*. Moscow: Nauka.
4. Samarskiy, A. A. (1983). *Teoriya raznostnykh skhem*. Moscow: Nauka.
5. Zgurovskiy, M. Z., Skopetskiy, V. V., Khrushch, V. K., & Biliaiev, M. M. (1997). *Chislennoye modelirovaniye rasprostraneniya zagryazneniya v okruzhayushchey srede*. Kyiv: Naukova dumka.
6. Düring, I., Bächlin, W., Ketzler, M., Baum, A., Friedrich, U., & Wurzler, S. (2011). A new simplified NO/NO₂ conversion model under consideration of direct NO₂-emissions. *Meteorologische Zeitschrift*, 20 (1), 67-73. doi: 10.1127/0941-2948/2011/0491
7. Berlov, O. V. (2016). Atmosphere protection in case of emergency during transportation of dangerous cargo. *Science and Transport Progress*, 1 (61), 48-54. doi: 10.15802/stp2016/60953
8. Chang, C.-H., Lin, J.-S., Cheng, C.-M., & Hong, Y.-S. (2013). Numerical simulations and wind tunnel studies of pollutant dispersion in the urban street canyons with different height arrangements. *Journal of Marine Science and Technology*, 21 (2), 119-126.
9. Overman, H. T. (2009). *Simulation model for NO_x distributions in a streey canyon with air purifying pavement*. (Master thesis). University Twente, Netherlands.
10. Nguyen, T. N., Nguyen, T. C., & Nguyen, V. T. (2015). Numerical simulation of wind flow and pollution transport in urban street canyons. *Advanced Science and Technology Letters*, 120, 770-777. doi: 10.14257/astl.2015.120.152

Статья рекомендована к публикации д.физ.-мат.н., проф. С. А. Пичуговым (Украина); д.т.н., проф. С. З. Полищуком (Украина)

Поступила в редколлегию: 10.02.2017

Принята к печати: 27.05.2017