

ЗАТВЕРДЖУЮ
Директор Інституту проблем
математичних машин і систем НАН
України
академік НАН України
(Грантоотримувач)



А.О.Морозов

АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проекту
із виконання наукових досліджень і розробок

«Прямі та обернені задачі розповсюдження забруднень в атмосферному і морському середовищі та їх використання для ідентифікації джерел забруднення»
(назва Проекту)

Назва конкурсу: «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

Реєстраційний номер Проекту: 2020.02/0048

Підстава для реалізації Проекту з виконання наукових досліджень і розробок (реєстраційний номер та назва Проекту 2020.02/0048) «Прямі та обернені задачі розповсюдження забруднень в атмосферному і морському середовищі та їх використання для ідентифікації джерел забруднення»

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» (назва конкурсу) протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проекту

Початок – 08.10.2020 - дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок;
Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проекту, грн : 7738200,00 грн (Сім мільйонів сімсот тридцять вісім тисяч двісті) гривень

Вартість Проекту по роках, грн.:

1-й рік	998200,00 грн. (дев'ятсот дев'яносто вісім тисяч двісті)
2-й рік	3500000,00 грн. (три мільйона п'ятсот тисяч) гривень
3-й рік	3240000,00 грн. (три мільйона двісті сорок тисяч) гривень

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проекту буде залучено 9 виконавців, з них:

доктори наук	3;
кандидати наук	0;
інші працівники	6.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ

Інститут проблем математичних машин і систем Національної академії наук України

Субвиконавці не залучені.

4. ОПИС ПРОЄКТУ

Математичне моделювання процесів у навколишньому середовищі є необхідним інструментом для реконструкції його минулого стану, для заповнення прогалів в даних моніторингу та для прогнозу майбутнього стану. Але розробка математичних моделей розповсюдження забруднень в атмосфері і поверхневих водах ускладнюється надзвичайно великим діапазоном просторових і часових масштабів гідрометеорологічних процесів, що впливають на дисперсію забруднень, фізико-хімічними перетвореннями забруднень, які потребують фундаментальних досліджень відповідних процесів та розвитку чисельних методів переносу забруднень. У багатьох випадках невідомі й основні характеристики джерел забруднень – обсяги та часова динаміка викидів, місця розташування джерел, а також параметри моделей що приводить до необхідності розв'язання обернених задач моделювання забруднень з метою уточнення вхідних даних моделей. Тому метою цієї роботи є створення нових методів моделювання динаміки забруднень в атмосферному і морському середовищі, заснованих на сучасних знаннях щодо гідродинаміки довкілля, параметризації фізико-хімічних трансформацій забруднень, методів оберненого моделювання для встановлення невідомих вхідних даних моделей, дослідження розробленими засобами прямого та оберненого моделювання динаміки радіоактивності під час радіаційних інцидентів та впровадження розроблених методів в інформаційну веб-систему аналізу засобами оберненого моделювання невідомих джерел радіоактивних забруднень в Україні та за її межами. Особливістю запропонованого проєкту є розробка методів прямого та оберненого моделювання та чисельних методів придатних як для повітряного, так і для водного середовища, та використання цих методів в моделюванні переносу забруднень в середовищі атмосфера-океан. Методи, моделі та веб-система, що розробляються, придатні для широкого класу забруднень, проте автори обмежуються одним з класів - радіонуклідами, з огляду на їх важливість у світлі аварій на Чорнобильській та Фукусімській АЕС, наявність великого масиву даних моніторингу і можливість використання радіонуклідів у якості трасерів при дослідженнях процесів у навколишньому середовищі. Проєкт складається з трьох частин, які послідовно виконуються: фундаментальних досліджень механізмів переносу радіоактивності в атмосферних та морських системах; прикладних досліджень, в яких розроблені моделі використовуються для прогнозування і реконструкції наслідків забруднення повітряного та морського середовища в результаті аварій на Чорнобильській та Фукусімській АЕС та інших радіаційних інцидентів; впровадження розроблених технологій в веб-систему аналізу засобами оберненого моделювання невідомих джерел радіоактивних забруднень в Україні та за її межами. Буде розроблено нові та вдосконалено наступні методидослідження та моделі:

- новий чисельний лагранжевий метод високого порядку точності для моделювання переносу забруднень в довкіллі, який дозволяє включити в алгоритм розрахунку реакції першого порядку;
- нова лагранжева модель переносу радіонуклідів в ланцюжках живлення морських екосистем;
- вдосконалена модель міграції радіонуклідів в донних відкладеннях з урахуванням процесів витискання порової води;
- новий метод асиміляції даних спостережень в моделях переносу забруднень;
- нова кінетично-алометрична модель розповсюдження радіонуклідів в ланцюжках живлення в морському екосистемах;
- вдосконалені методи розв'язання оберненої задачі моделювання забруднень шляхом розробки та реалізації методів оцінки невідомих регуляризаційних параметрів та коваріаційних матриць у функціоналі якості, який підлягає мінімізації у ході моделювання;

Будуть вперше досліджені:

- динаміка радіоактивності під час радіаційних інцидентів, що зачіпали територію України (детектування рутенію у 2017 р, та інші);
- джерела викиду радіоактивності під час пожеж у Чорнобильській зоні відчуження (ЧЗВ) методами оберненого моделювання
- забруднення Чорного моря радіоцезієм в період 1986-2013 за допомогою асиміляції даних спостережень в моделі переносу забруднень;

- моделювання методами оберненого моделювання переносу забруднення в системі атмосфера-океан в результаті викиду радіонуклідів в атмосферу;

Вперше буде створено інформаційну систему для автоматизованого аналізу невідомих джерел забруднень на території України та за її межами шляхом оберненого моделювання атмосферного перенесення. Розроблена система аналізу можливих джерел забруднень буде налаштована для оперативного функціонування в експериментальному режимі в ПММС НАН України. Буде надано вільний веб-доступ до системи, що дозволить усім бажаючим проводити власні розрахунки у випадках небезпечних екологічних ситуацій в Україні. Для України робота в цілому є унікальною, оскільки в Україні не тільки не існує оперативної системи для автоматизованого аналізу невідомих джерел забруднень, але й дослідницькі роботи на сучасному рівні у напрямку створення такої системи не проводились.

4.1. Мета Проекту (до 200 знаків)

Метою роботи є створення нових методів моделювання динаміки забруднень в атмосферному і морському середовищі, заснованих на сучасних знаннях щодо гідродинаміки довкілля, параметризації фізико-хімічних трансформацій забруднень, методів оберненого моделювання для встановлення невідомих вхідних даних моделей, дослідження розробленими засобами прямого та оберненого моделювання динаміки радіоактивності під час радіаційних інцидентів та впровадження розроблених методів в інформаційну веб-систему аналізу засобами оберненого моделювання невідомих джерел радіоактивних забруднень в Україні та за її межами. Особливістю запропонованого проєкту є розробка методів прямого та оберненого моделювання та чисельних методів придатних як для повітряного, так і для водного середовища, та використання цих методів в моделюванні переносу забруднень в середовищі атмосфера-океан. Методи, моделі та веб-система, що розробляються, придатні для широкого класу забруднень, проте автори обмежуються одним з класів - радіонуклідами, з огляду на їх важливість у світлі аварій на Чорнобильській та Фукусімській АЕС, наявність великого масиву даних моніторингу і можливість використання радіонуклідів у якості трасерів процесів у навколишньому середовищі.

4.2. Основні завдання Проекту (до 400 знаків)

- 1) Розробка нових лагранжевих моделей переносу забруднень високого порядку точності для моделювання переносу забруднень в атмосфері і океані;
- 2) Побудова моделей міграції радіонуклідів на намулах у водному стовпі, у донних відкладеннях та розповсюдження радіонуклідів в ланцюжках живлення в морських екосистемах;
- 3) Розробка методів оберненого моделювання та асиміляції даних у моделях розповсюдження забруднень в атмосфері і океані;
- 4) Дослідження засобами прямого та оберненого моделювання динаміки радіоактивності в системі атмосфера-океан, зокрема у Чорному морі;
- 5) Дослідження засобами прямого та оберненого моделювання динаміки радіоактивності під час радіаційних інцидентів, що зачіпали територію України (детектування рутенію у 2017 р та інші);
- 6) Створення інформаційної веб-системи аналізу засобами оберненого моделювання невідомих джерел радіоактивних забруднень на території України та за її межами.

4.3. Детальний зміст Проекту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Математичне моделювання процесів у навколишньому середовищі є необхідним інструментом для реконструкції минулого стану, для заповнення прогалів в даних моніторингу та для прогнозу майбутнього стану. Перенос забруднень описується ейлеровими і лагранжевими методами. Лагранжеві методи моделювання переносу забруднень в навколишньому середовищі мають ряд суттєвих переваг в порівнянні з ейлеровими, зокрема вони гарантують збереження маси речовини і є вільними від чисельної дифузії [1]. Вони також здатні правильно описати асимптотичні співвідношення для розподілу концентрації домішки поблизу джерела, де дисперсія домішок за рахунок турбулентності зростає з часом лінійно, що не описується дифузійними моделями. Відповідно, у сучасних системах прогнозування наслідків аварійних викидів, наприклад у системі Євросоюзу з ядерного аварійного реагування RODOS, широко використовуються

лагранжеві моделі [2]. Однак актуальною проблемою подальшого розвитку лагранжевих моделей є підвищення точності рішення відповідних стохастичних рівнянь, що описують динаміку ансамблю лагранжевих частинок і врахування хімічних реакцій взаємодії з зваженими твердими частинками. Довгостроковим фактором забруднення водою є забруднення донних покладів таких як, напр. відкладення в Київському водосховищі або відкладення океанського шельфу в околі АЕС Фукусіма, які є істотним джерелом забруднення води та морських організмів [3]. Окрім прямого моделювання, коли усі вхідні дані моделі відомі або оцінені і розраховуються часові та просторові розподіли залежних змінних (координат лагранжевих частинок), необхідно обернене моделювання, коли за даними вимірів встановлюються невідомі значення вхідних параметрів моделей, наприклад, характеристики джерел викидів. У загальному випадку обернені задачі моделювання ставляться, як задачі мінімізації функціоналу якості по відношенню до вектору невідомих параметрів, які потребують оцінки або уточнення [4]. У деяких випадках таке моделювання дозволяє встановити місця розташування невідомих джерел забруднень, або звизити території для їхнього пошуку [5]. До обернених задач відносяться і так звані задачі асиміляції даних, коли уточнюється саме поле залежних змінних (наприклад, у випадку ейлерових моделей – концентрацій, а у випадку лагранжевих – координат частинок) з використанням наявних даних вимірів. Особливий інтерес представляє побудова полів концентрації забруднень за даними нерегулярних в часі і просторі вимірювань в морях. Існуючі методи, засновані на методах оптимальної інтерполяції, для цієї мети непридатні. В роботі авторів [6] був розроблений метод заснований на вирішенні рівняння переносу з засвоєнням даних за методом ітерацій до оптимального рішення. Однак, цей підхід потребує удосконалення у напрямі побудови більш адекватних апроксимацій коваріаційних матриць похибок моделювання, які відіграють ключову роль у результатах асиміляції. Попри досить успішне використання моделей атмосферного перенесення для розв'язання обернених задач для пошуку невідомих джерел викидів, у світі до сих пір практично не існує автоматизованих систем для розв'язання подібних задач, оскільки задовільний розв'язок може бути отриманий тільки при використанні моделей експертами високого рівня кваліфікації. Однак, з оглядом на усе ширше впровадження моделювання у практику організацій, відповідальних за реагування на екологічні аварії, та відповідне зростання обізнаності вітчизняних та закордонних експертів у використанні моделей розповсюдження забруднень, розвиток подібних інформаційних експертних систем для аналізу та ідентифікації невідомих джерел забруднень за даними вимірів у наш час є не тільки доцільним, але й необхідним.

- Новизна Проекту (до 400 знаків)

Будуть розроблені нові та вдосконалені методи дослідження та моделі:

- новий чисельний лагранжевий метод високого порядку точності для моделювання переносу забруднень в довкіллі, який дозволяє включити в алгоритм розрахунку реакції першого порядку;
- нова лагранжева модель переносу радіонуклідів в ланцюжках живлення морських екосистем;
- вдосконалена модель міграції забруднень (радіонуклідів) в донних відкладеннях з урахуванням процесів витискання порової води;
- новий метод асиміляції даних спостережень в моделі переносу забруднень;
- нова кінетично-алометрична модель розповсюдження радіонуклідів в ланцюжках живлення в морському екосистемах;
- вдосконалені методи розв'язання оберненої задачі моделювання забруднень шляхом розробки та реалізації методів оцінки невідомих регуляризаційних параметрів та коваріаційних матриць у функціоналі якості, який підлягає мінімізації у ході моделювання;

Будуть вперше досліджені:

- динаміка радіоактивності під час радіаційних інцидентів, що зачіпали територію України (детектування рутенію у 2017 р, та інші);
- джерела викиду радіоактивності під час пожеж у Чорнобильській зоні відчуження (ЧЗВ) методами оберненого моделювання
- забруднення Чорного моря радіоцезієм в період 1986-2013 за допомогою асиміляції даних спостережень в моделі переносу забруднень;

Вперше буде створено інформаційну систему для автоматизованого аналізу невідомих джерел забруднень шляхом оберненого моделювання атмосферного перенесення. Інноваційна цінність проекту полягає в наступному: для України робота в цілому є унікальною, оскільки в Україні не тільки не існує оперативної системи для автоматизованого аналізу невідомих джерел забруднень, але й дослідницькі роботи на сучасному рівні у напрямі створення такої системи не проводились.

- **Методологія дослідження (до 400 знаків)**

Пропоноване мультидисциплінарне дослідження знаходиться на стику різних областей науки: математичного моделювання, механіки рідини та газу, метеорології, океанології і радіоекології. Математичне моделювання, чисельні методи та використання веб-технологій є головними методологіями спільними для досліджень забруднення атмосфери та моря в проекті. Розвивається оригінальний чисельний лагранжевий метод високого порядку точності для моделювання переносу забруднень в довкіллі, який дозволяє включити в алгоритм розрахунку реакції першого порядку, які описуються мастер-рівнянням Колмогорова [1]. Цей підхід, заснований на методі моментів, є вільним від обмежень на часовий крок в стандартному методі та від чисельної дифузії притаманної ейлеровим чисельним методам. Він використовується в проекті для моделювання розповсюдження забруднень в морях, та, зокрема, для дослідження процесу вимивання нуклідів і важких металів з води при падінні частинок намулів органічного і неорганічного походження (scavenging) в океані. Міграція радіонуклідів в донних відкладеннях моделюється шляхом узагальнення розробленої авторами [2] багаточислової і багато-фракційної моделі твердих частинок та порової води під впливом біотурбації та ерозії/випадіння намулів. Поряд з ейлеровою моделлю неперервного розподілу відкладень та забруднень будуть розроблені лагранжеві алгоритми міграції забруднень у відкладеннях та в ланцюжках живлення. Алометричний підхід (залежність швидкості метаболічних процесів в організмі від його маси) та неоднорідність розподілу забруднень між тканинами покладені в основу моделі ланцюжків живлення в морському середовищі, яка узагальнює роботу авторів [3]. Розв'язання обернених задач моделювання забруднень в атмосфері та поверхневих водах базується на використанні варіаційних методів асиміляції даних вимірів та спряжених рівнянь моделей перенесення. Спряжені рівняння використовуються для побудови функції рецептор-джерело, яка дозволяє отримувати результати моделі у точках вимірів без повторного прогону моделі [4,5]. Формулювання функціоналу якості, який підлягає мінімізації у ході розв'язання обернених задач базується на методах математичної статистики, які використовуються для отримання та моделювання коваріаційних матрицею похибок розрахункових полів, зокрема, з використанням ансамблевого фільтру Калмана. Для оперативного застосування розроблених методів доцільно використовувати спрощені форми функціоналу якості, які дозволяють отримувати розв'язання обернених задач у реальному часі, як наприклад у [4,5].

Для створення інформаційної системи аналізу джерел викидів на основі оберненого моделювання будуть використані технології веб-програмування на основі мов Java JavaScript, PHP, система управління базами даних PostgreSQL та її розширення для роботи з геопросторовими даними PostGIS, бібліотеки для роботи з геопросторовими даними GeoTools, відкриті джерела геопросторових даних OpenStreetMaps та інші. Технологічною основою нової системи буде раніше розроблена авторами проекту веб-система «Повітря» прогнозування атмосферних забруднень внаслідок аварійних викидів в Україні ([6], http://cloud-2.bitp.kiev.ua/airsystem_english/airsystem_connect.html).

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проекту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проекту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

1. Зроблений огляд існуючих прямих та обернених методів та уточнені задачі проекту на основі цього огляду.
2. Побудовані чисельні лагранжеві методи моделювання переносу забруднень високого порядку точності з включенням в алгоритм розрахунку реакцій першого порядку. Розроблено алгоритм

відстеження частинок на основі методу моментів. Процес видалення розчинених елементів в океані шляхом адсорбції на осіданні твердих частинок (очищення) досліджено аналітично та за допомогою розробленої чисельної лагранжевої моделі. Розроблено узагальнену модель очищення в багатокомпонентному реактивному середовищі з кінетикою першого порядку, що складається з води та багатофракційних зважених твердих частинок. Отримані нові автотельні розв'язки задач для ідеалізованого випадку миттєвого викиду реактивного радіонукліду на поверхню океану. Аналітично було встановлено, що дисперсія забруднення, спричиненого оборотним фазовим переходом із збільшенням швидкості осідання, концентрації твердих частинок та коефіцієнта розподілу, може бути набагато більшою, ніж спричинена дифузиею, тоді як збільшення швидкості десорбції призводить до зменшення дисперсії, спричиненої фазовим переносом. Досліджене видалення з води $^{239,240}\text{Pu}$, який поступив на поверхню океану через випадіння в результаті минулих випробувань ядерної зброї. Результати моделювання узгоджувались із спостереженнями в північній частині Тихого океану. Було показано, що навіть якщо концентрація $^{239,240}\text{Pu}$ на твердих частинках не перевищує 2% від загальної концентрації, осідання твердих частинок відіграє вирішальну роль у вертикальному транспорті та диспергуванні радіонукліду.

3. Побудовані рівняння модифікованої моделі міграції забруднень в донних відкладеннях, які порівнюються з квазі-рівноважними моделями на прикладі лабораторного експерименту. Приведені результати порівняння з спостереженнями забруднення дна в Тихому океані після аварії на АЕС Фукусіма узгоджуються з вимірами.

4. Розроблено новий підхід до прогнозування накопичення радіонуклідів у рибі з урахуванням неоднорідності розподілу забруднень в організмі та залежності швидкості обмінних процесів від маси риби. Організм риби був представлений камерами для трьох груп тканин / органів (м'язи, кістки, органи) та двома відділами для входу, що представляють зябра та травний тракт. Поглинені елементи перерозподіляються між органами / тканинами, а потім усуваються відповідно до їх метаболічної функції. Швидкість поглинання їжі та води, швидкість виведення та швидкість росту залежать від швидкості метаболізму, яка масштабується за масою риби у ступені 3/4. Ця модель є проміжною за складністю і забезпечує альтернативу базовим / спрощеним моделям цілого організму та складними фармако-кінетичним моделям. Аналітичні розв'язки задачі продемонстрували добру узгодженість з лабораторними експериментами для процесів очищення організму після одноразового годування риби радіоактивно міченою їжею та забруднення організму за рахунок радіоактивності розчиненої у воді.

5. Побудований новий алгоритм розрахунків в чисельній лагранжевій моделі переносу забруднень у воді, намулах та в ланцюжках живлення в морських екосистемах, який дозволив вести розрахунки переносу забруднень у різних середовищах виключно лагранжевими методами.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

Нові моделі процесів переносу забруднень у морському середовищі дозволять краще описати складні фізико-хімічні процеси у воді донних відкладеннях та у біоті, особливо в умовах аварійних викидів, ніж у існуючих підходах до моделювання (див. огляд Perriez et al. , 2019).

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проекту для економіки та суспільства (стосується проектів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Розроблені математичні моделі і методи складають наукову основу аналізу та прогнозування стану довкілля, без яких неможливе досягнення цілей сталого розвитку Української держави. Для України робота в цілому є унікальною, оскільки в Україні не тільки не існує оперативної системи для автоматизованого аналізу невідомих джерел забруднень, але й дослідницькі роботи на сучасному рівні у напрямі створення такої системи не проводились. Важливим суспільним аспектом проекту є підтримка досліджень молодих учених та студентів, що вкрай важливо для формування інтелектуальної еліти країни.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проекту в суспільній практиці.

Розроблені методи моделювання та інформаційні технології можуть бути впроваджені у відповідних організаціях центральної та регіональної виконавчої влади, насамперед – Міністерстві екології, ДСНС та Українському гідрометцентрі, ДІЯРУ, а також використані ширшим колом експертів та дослідників для детального аналізу розподілу забруднень у повітряному та водному середовищі України при аварійних ситуаціях. За результатами проведених досліджень підготовлені та представлені до друку три роботи в наукових фахових виданнях, що входять до наукометричних баз Scopus, Web of Science тощо, з посиланням на грантову підтримку з боку Національного фонду досліджень України щодо виконання цієї роботи:

1. Bezhenar, R., Kim, K. O., Maderich, V., de With, G., and Jung, K. T.: Multi-compartment kinetic-allometric model of radionuclide bioaccumulation in marine fish, Biogeosciences Discuss., <https://doi.org/10.5194/bg-2020-423>, in review, 2020.
2. Maderich V., Kim K.O., Brovchenko I., Kivva S., Kim H. Scavenging processes in multicomponent medium with first-order reaction kinetics: Lagrangian and Eulerian modeling. Environmental Fluid Mechanics, in review, 2020.
3. Talerko, M., Kovalets, I., Lev, T., Romanenko, O. Simulation study of the radionuclide atmospheric transport after wildland fires in the Chernobyl Exclusion Zone in April 2020. Atmospheric Pollution Research, in review, 2020.

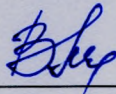
Науковий керівник Проекту

Завідувач відділом, д.ф.-м.н., професор

(посада)

Мадерич В.С.

ПІБ



(підпис)