УДК 504.3.054

Р.О. СИНКЕВИЧ*

МЕТОДИ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ СИСТЕМИ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ДЖЕРЕЛ РАДІОАКТИВНИХ АТМОСФЕРНИХ ЗАБРУДНЕНЬ ШЛЯХОМ ОБЕРНЕНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

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

Анотація. У роботі проведено огляд методів ідентифікації невідомого джерела забруднення шляхом оберненого моделювання та інформаційних систем прогнозування й аналізу атмосферних забруднень. На підставі моделей атмосферного перенесення розроблено декілька різних закордонних та вітчизняних систем прогнозування атмосферних забруднень, наприклад, система Євросоюзу з ядерного аварійного реагування РОДОС. Але ключовими даними, які визначають якість прогнозування у таких системах, є характеристики джерела викиду. У випадку детектування забруднення від невідомого джерела викиду необхідно здійснювати обернене моделювання. Використання системи РОДОС, як і інших існуючих систем прогнозування, для такого завдання можливе, але потребує багаторазового ручного запуску розрахунків моделей атмосферного перенесення в оберненому режимі. Представлені у роботі результати застосування методів оберненого моделювання під час радіаційних інцидентів останнього десятиріччя показують, що сучасні методи оберненого моделювання достатньо розвинуті для того, щоб ставити задачу про автоматизацію оберненого моделювання в інформаційних системах аналізу і прогнозування атмосферних забруднень. Навіть при тому, що дані методи не завжди здатні точно вказати джерело викиду внаслідок браку вимірів та поганої обумовленості оберненої задачі атмосферного перенесення, їх застосування завжди приводить до істотного зменшення (на порядок і більше) області пошуку невідомих джерел у порівнянні з областю детектування забруднюючих речовин. В існуючих системах прогнозування, на даний час, методи оберненого моделювання автоматизовані лише частково, а саме для випадку відомого розташування та невідомих обсягів викидів джерела забруднень. Тому у даній роботі запропоновано архітектуру майбутньої системи ідентифікації викидів невідомих джерел шляхом оберненого моделювання.

Ключові слова: аварійне забруднення, атмосферне перенесення, обернене моделювання.

Abstract. The paper reviews the methods for identifying an unknown source of pollution by inverse modeling and information systems for air pollution forecasting and analysis. Several different foreign and Ukrainian air pollution forecasting systems, such as the European Union's Nuclear Emergency Response System RODOS, have been developed on the basis of atmospheric transport models. However, the key data that determine the quality of forecasting in such systems are the characteristics of the emission sources. In the case of detection of pollution from an unknown emission source, there should be performed inverse simulation. The use of the RODOS system, as well as other existing forecasting systems for such a task is possible but it requires multiple manual start of calculations of atmospheric transfer models in the reverse mode. Presented in the paper results of the application of inverse modeling methods during radiation incidents of the last decade demonstrate that modern methods of inverse modeling are sufficiently developed to set the task of automating inverse modeling in information systems for air pollution analysis and forecasting. Even though these methods not always can exactly identify the source of emissions due to the lack of measurements and poor conditioning of the inverse atmospheric transport problem, their application always leads to a significant reduction (by an order of magnitude or more) in the search for unknown sources compared to the detection of pollutants. At present, in the existing forecasting systems the methods of inverse modeling are only partially automated, namely for the case of known location and unknown emissions of the source of pollution. Therefore, this paper proposes the architecture of the future system for identifying unknown sources of emissions by inverse modeling.

Keywords: accidental pollution, atmospheric transport, inverse modeling.

1. Вступ

В останні роки почастішали випадки детектування антропогенного забруднення атмосфери, коли джерело даного забруднення є невідомим. Прикладами таких випадків є детектування йоду-131 на території Європи у 2011, 2016 та 2017 рр. [1-4] та детектування рутенію (Ru-106) на території Євразії у 2017 р. У таких випадках постає задача про оцінку місцезнаходження джерел викидів, кількісну оцінку часу та обсягу викидів. До цього часу зусилля дослідників здебільшого були зосереджені на розробці математичних методів розв'язання оберненої задачі атмосферного перенесення, тобто оцінці характеристик невідомих джерел забруднень шляхом підбору таких характеристик викиду у моделі атмосферного розповсюдження забруднень, які б забезпечили найменше відхилення результатів моделювання атмосферного забруднення у порівнянні з вимірами [5]. Методи оцінки місцезнаходження невідомих джерел радіоактивних викидів, зокрема, розглядались у роботах [2-4, 6, 7]. Значно меншу увагу приділено розробці автоматизованих інформаційних систем оцінки невідомих характеристик атмосферних забруднень шляхом оберненого моделювання. У роботі [8] автоматизовано метод оцінки невідомих обсягів і радіонуклідного складу при відомому місцезнаходженні джерела з використанням вимірів потужностей дози. Однак аналогічні роботи у напрямі встановлення невідомого місцезнаходження джерела практично не проводились.

Отже, *метою даної роботи* є огляд існуючих методів оберненого моделювання радіоактивних забруднень та відповідних існуючих інформаційних систем підтримки рішень, а також розробка пропозицій щодо майбутньої інформаційної системи ідентифікації розташування джерел радіоактивних забруднень шляхом оберненого моделювання.

2. Математичні моделі перенесення атмосферного забруднення

Моделі атмосферного перенесення (МАП) описують фізико-хімічні процеси перенесення і трансформації забруднюючих речовин (ЗР) в атмосфері та пов'язують інтенсивності викидів ЗР з отриманими концентраціями ЗР в атмосферному повітрі. Як вхідні дані МАП потребують інформації про характеристики джерел ЗР (обсяги викидів, їх просторовий та часовий розподіл), метеорологічні та географічні дані. Основними результатами моделювання є часова динаміка концентрацій та щільності осадження ЗР у визначених точках, наприклад, на регулярній сітці, що покриває певну територію, та у довільних точках. З погляду методології побудови моделей, для розв'язання прогнозних задач при моделюванні навколишнього середовища найбільш відомими є такі математичні моделі.

Емпіричні моделі – це моделі, які мають вигляд досить простих алгебраїчних співвідношень, з яких визначаються шукані величини, наприклад, концентрація забруднення. Прикладами таких моделей є офіційно затверджені в Україні методики оцінки територій ураження унаслідок викиду небезпечних хімічних речовин, які автоматизовано у системі «Повітря» [9].

Гауссова модель атмосферного перенесення [10] є однією з найбільш популярних МАП завдяки простоті її використання. Рівняння, яке описує розподіл забруднюючої речовини для стаціонарного випадку, що викидається з безперервного джерела:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \times \left\{ \exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right\},$$
 (1)

де C(x, y, z) – концентрація забруднюючої речовини в точці з координатами x, y, z, H[M] – висота викиду над рівнем поверхні Землі, $Q[\kappa r/c]$ – інтенсивність викиду, параметри ди-

сперсії σ_y, σ_z [м] обчислюються як функція відстані від джерела та категорії стійкості. У формулі передбачається повне відбиття хмари від поверхні Землі, що вважається плоскою і нехтується впливом обмеженої глибини планетарного примежового шару атмосфери.

Лагранжево-ейлерові моделі атмосферного перенесення (або моделі гауссових «пуфів») використовують напівемпіричне співвідношення для розподілу ЗР унаслідок миттєвого викиду. Концентрація від окремого викиду (пуфа) у довільній точці обчислюється шляхом сумування внеску від різних пуфів [11].

Лагранжеві моделі описують перенесення частинок речовини вітром. При цьому, окрім перенесення вітром, частинки ще й здійснюють випадкові блукання. Частинки можуть вважатися матеріальними точками (наприклад, у моделі FLEXPART [12]) або характеризуються розмірами, які змінюються з часом, аналогічно пуфам (наприклад, у моделі DIPCOT [13]). У першому випадку концентрація речовини у довільній точці обчислюється шляхом підрахунку кількості частинок у певному об'ємі навколо даної точки. У другому випадку використовується така ж формула для розрахунку концентрацій, як і в лагранжево-ейлерових моделях.

Ейлерові моделі описують дисперсію атмосфери за допомогою тривимірного адвекційно-дифузійного рівняння для концентрації (або відношення суміші), визначеної у вузлах сітки. Наприклад, для процесів розрахунку транспорту на далекі відстані ~1000 км можна використовувати рівняння (2) для відношення суміші C [кг/кг] (відношення маси забруднювача до маси суміші у одиниці об'єму):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + \omega \frac{\partial c}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial x} K_h \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} K_h \frac{\partial c}{\partial y} - \frac{g^2}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial p} \rho_0^3 K_z \frac{\partial c}{\partial p} = \frac{S}{\rho_0 g}.$$
 (2)

Тут тиск ρ_0 відіграє роль вертикальної координати, u, v – горизонтальні компоненти швидкості, як вертикальна компонента швидкості використовуються змінні $\omega \equiv dp/dt$, для апроксимації вертикальних дифузійних потоків у ρ -системі координат через коефіцієнт вертикальної дифузії K_z використано співвідношення $\omega \approx -\rho gw$, густина $\rho(x, y, z)$ представлена як сума незбуреного розподілу $\rho_0(p)$ та збурення $\rho'(x, y, p): \rho = \rho_0 + \rho'$, а члени з ρ' відкинуті як малі у порівнянні з іншими членами рівняння. Для моделювання розповсюдження на середні відстані (~100 км), як правило, використовують рівняння адве-

ктивного транспорту, записане у σ-системі координат, яка «відстежує» рельєф місцевості. Переваги ейлеревих моделей при моделюванні атмосферних забруднень полягають у такому: 1) вони моделі не потребують додаткових обчислювальних ресурсів при збільшенні кількості джерел і моделюванні площинних джерел; 2) можливість згущення сітки навколо довільно визначених областей із метою з'ясування деталей розподілу забруднень; 3) можливість урахування впливу забруднення на метеорологічні характеристики шляхом розв'язання повної системи рівнянь гідродинаміки (термальної колони, важких газів, вплив на радіаційні процеси).

Одним із основних недоліків ейлеревих моделей є те, що оскільки у транспортних процесах в атмосфері переважає перенесення вітром, при дискретизації оператора перенесення в рівняннях виникає штучна «дифузія», боротьбі з якою було присвячено багато робіт із розробки сучасних чисельних схем [14].

3. Оцінка параметрів моделей як обернена задача моделювання

3.1. Постановка оберненої задачі

Формалізацію постановки задачі про оцінку параметрів моделей як обернену задачу моделювання в узагальненому вигляді можна сформувати на підставі байєсовської теорії оцінювання [8]. Об'єднавши наявні спостереження у вектор $\overline{y} \in \mathbb{R}^{N_o}$, де N_o – загальна кількість вимірювань (у загальному випадку відрізняється від кількості станцій моніторингу). Параметри моделі, які необхідно знайти у процесі розв'язання оберненої задачі (наприклад, координати місцезнаходження та інтенсивність викиду), потрібно об'єднати у вектор \overline{x} (який іноді називають «контрольним вектором»), тоді як інші параметри вважаються відомими. Модель можна визначити як нелінійний (у загальному випадку) оператор g(.), який ставить у відповідність вектору \overline{x} вектор модельних значень, що відповідають вимірам (наприклад, концентрації ЗР у місцях розташування та у час здійснення відповідних вимірів): $\overline{y} \approx g(\overline{x})$ (приблизна рівність означає, що модель має похибку).

Позначимо функцію умовного розподілу ймовірності спостережень із заданими векторами параметрів як $P(\bar{y} | \bar{x})$. Апріорна інформація про вектор \bar{x} описується функцією умовного розподілу ймовірності $P(\bar{x})$. Тоді обернену задачу можна було б поставити як проблему пошуку апостеріорної функції розподілу ймовірності $P(\bar{x} | \bar{y})$ вектора \bar{x} при умові наявності спостережень \bar{y} та значення вектора невідомих \bar{x}^s , яке мінімізує апостеріорну функцію розподілу. Для знаходження функції $P(\bar{x} | \bar{y})$ використовується відома формула Байєса [5]. Шляхом застосування цієї формули можна показати, що максимум функції розподілу ймовірностей збігається з мінімумом функції J:

$$J\left(\overline{x}\right) = \sum_{l} \frac{\left(y_{l} - g_{l}\left(\overline{x}\right)\right)^{2}}{\sigma_{O,l}^{2} + \sigma_{M,l}^{2}} + \sum_{l} \frac{\left(x_{l} - x_{l}^{B}\right)^{2}}{\sigma_{B,l}^{2}} \rightarrow \min, \qquad (3a)$$

або

$$J(\overline{x}) = (\overline{y} - g(\overline{x}))^{T} \underline{\underline{R}}^{-1} (\overline{y} - g(\overline{x})) + (\overline{x} - \overline{x}^{B})^{T} \underline{\underline{B}}^{-1} (\overline{x} - \overline{x}^{B}) \to \min.$$
(3b)

Тут \bar{x}^{B} – це апріорна оцінка (перше наближення) невідомого вектора x, \underline{R} і \underline{B} матриці коваріації помилок, у даному випадку, діагональні:

$$r_{ll} = \sigma_{O,l}^2 + \sigma_{M,l}^2, \ b_{ll} = \sigma_{B,l}^2,$$
(3c)

а $\sigma_{0,l}^2, \sigma_{M,l}^2, \sigma_{B,l}^2$ – дисперсії похибок вимірів, моделі і першого наближення відповідно.

У випадку, коли оператор моделі $g(\overline{x}) \in \pi$ лінійним:

$$g\left(\overline{x}\right) = \underline{G}\overline{x} , \qquad (4)$$

$$J(\overline{x}) = \left(\overline{y} - \underline{\underline{G}}\overline{x}\right)^T \underline{\underline{R}}^{-1} \left(\overline{y} - \underline{\underline{G}}\overline{x}\right) + \left(\overline{x} - \overline{x}^B\right)^T \underline{\underline{B}}^{-1} \left(\overline{x} - \overline{x}^B\right) = J_1 + J_2.$$
(5)

У такому випадку задача мінімізації є задачею лінійної регресії.

У більш загальному випадку оператор $g(\bar{x}) \epsilon$ нелінійним, як, наприклад, у випадку, коли невідоме місце розташування точкового джерела і вектор $\bar{x} = (x_s, y_s, z_s, t_s, T_s, Q)^T$ складаються з невідомих координат, часу початку, інтервалу дії джерела та обсягу викиду. У такому випадку задача мінімізації функції (3b) стає задачею нелінійної регресії, функція якості не опукла, що значно ускладнює знаходження мінімуму. Можна спробувати замінити функцію якості (3b) на кореляційну функцію зі зворотним знаком, як зроблено у роботі [6]:

$$J(\overline{x}) = -\frac{\left\langle \left(\overline{y} - \langle \overline{y} \rangle\right) \left(g(\overline{x}) - \langle g(\overline{x}) \rangle\right) \right\rangle}{\left(\left\langle \left(\overline{y} - \langle \overline{y} \rangle\right)^2 \right\rangle \left\langle \left(g(\overline{x}) - \langle g(\overline{x}) \rangle\right)^2 \right\rangle \right)^{1/2}}.$$
(6)

Функція якості (6) не залежить від обсягу викиду. Таким чином, її використання дозволяє розділити задачу на два етапи: на першому етапі мінімізація (6) дозволяє встановити просторове місцезнаходження та часові характеристики дії джерела, а на другому етапі – визначити обсяги викидів.

3.2. Функція «джерело рецептор»

Для ефективного вирішення задачі мінімізації (3) потрібно оцінити концентрації в місцях та часі вимірювань c_m для довільних значень вектора \bar{x} . Теоретично цього можна було б досягти шляхом розв'язання прямої моделі, але такий підхід є неефективним, оскільки вимагає $N_s \cdot N_t \cdot N_\delta$ прогонів прямої моделі (N_s – кількість можливих розташувань джерела, N_t – кількість варіантів часу початку джерела, N_δ – кількість варіантів тривалості джерела).

Широко вживаним методом є розв'язання спряжених рівнянь для встановлення так званої функції «джерело-рецептор» (ДР). Метод спряжених рівнянь був розроблений у роботах [15–16]. Опишемо тут даний метод у застосуванні до Ейлерової моделі атмосферного перенесення згідно з [6]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (uc)}{\partial x} + \frac{\partial (vc)}{\partial y} + \frac{\partial (wc)}{\partial z} + Diff(c) + Decay(c) = q(x, y, z, t), \quad (7)$$

де (u, v, w) – компоненти швидкості вітру, Diff(c) є тривимірним оператором дифузії, Decay(c) описує радіоактивний розпад, сухе та вологе осадження, q [Бк/м3с] – об'ємний розподіл щільності джерел. Вважаємо, що рівняння (7) розв'язується у просторовій області Ω на інтервалі часу (0,T), водночас рівняння (7) є дещо спрощеним варіантом рівняння (2).

Якщо *n*-й компонент моделі-вектора c_m визначається в місці *n*-го вимірювання $(x_{o,n}, y_{o,n}, z_{o,n})$ і часовий інтервал *n*-го вимірювання $(t_{o,n}, t_{o,n} + \delta t_{o,n})$, можна показати, що розв'язок спряженого рівняння буде

$$-\partial c_n^* / \partial t - u \partial c_n^* / \partial x - v \partial c_n^* / \partial y - w \partial c_n^* / \partial z + Diff(c_n^*) + Decay(c_n^*) = p_n,$$
(8)

при інтегруванні назад у часі від $t = t_{o,n} + \delta t_{o,n}$ до t = 0 задовольняє такому співвідношенню:

$$c_m(n) = \iiint_{\Omega} \int_{0}^{t_{o,n} + \delta t_{o,n}} c^* \cdot q \cdot dx dy dz dt$$
(9)

за умови, що у рівнянні (8) $p_n \epsilon$ так званою «пробною функцією», за допомогою якої *n*-та компонента вектора моделі (для порівняння з *n*-м виміром) формально визначається через рівняння

$$c_m(n) = \iiint_{\Omega} \int_{t_{o,n}}^{t_{o,n} + \delta t_{o,n}} c \cdot p_n dx dy dz dt .$$
⁽¹⁰⁾

Для миттєвого вимірювання у точці $(x_{o,n}, y_{o,n}, z_{o,n})$ у момент часу $t_{o,n} p_n \in$ добутком дельта-функцій $p_n = \delta(x - x_{o,n})\delta(y - y_{o,n})\delta(z - z_{o,n})\delta(t - t_{o,n})$.

При цьому оператор дифузії у рівнянні (8) є самоспряженим. Отже, у спряженому рівнянні він має той самий вигляд, що і у вихідному рівнянні. Те саме стосується оператора розпаду, що описує радіоактивний розпад і мокре осадження, оскільки він має вигляд $Decay(c) = \chi c$, де χ є коефіцієнтом, що описує як радіоактивний розпад, так і вологе випадіння, і залежить від інтенсивності опадів, але не від c, тобто оператор залишається лінійним. Описана вище форма оператора також є самоспряженою, отже, у спряженому рівнянні цей оператор також не змінюється. Далі сухе осадження описується за допомогою граничної умови на твердій межі таким чином: $K_z \partial c/\partial z|_{z=z_B} = v_d c$, де K_z – коефіцієнт вертикальної дифузії, z_B позначає нижню межу обчислювальної області і v_d – швидкість сухого осадження. У спряженому рівнянні (8) слід використовувати точно таку саму граничну умову, але для спряженої змінної, тобто знак швидкості сухого осадження також не змінюється.

У важливому випадку точкового джерела з координатами (x_s, y_s, z_s) і постійної швидкості викиду q_s протягом часового інтервалу $(t_s, t_s + \delta_s)$ і нуль в іншому випадку розрахункові значення концентрації, що відповідають вимірам, отримуються множенням q_s на дельта-функції, що визначають розташування точкового джерела. У цьому випадку виконується таке рівняння:

$$c_m(n) = q_s \int_{t_s}^{t_s + \delta t_s} c^*(x_s, y_s, z_s, t) dt, \qquad (11)$$



Рисунок 1 – Схематичне зображення принципу використання функції «джерело-рецептор»

Таким чином, для отримання функції ДР необхідно розв'язати стільки спряжених рівнянь, скільки вимірів використовується для встановлення характеристик джерела викиду. Розв'язання спряженого рівняння, що відповідає ј-му виміру, дозволяє з використанням співвілношення (11)легко обчислювати, як зміниться концентрація моделі, що відповідає јму виміру при розташуванні джерела в довільній комірці сітки в довільний момент часу (рис. 1).

3.3. Приклади застосування методів оберненого моделювання

Методи оберненого моделювання застосовують у задачах моделювання перенесення забруднень в атмосферному і морському середовищах. При цьому з метою визначення характеристик джерел забруднень їх можна поділити на два типи: а) застосування для випадків, коли місцезнаходження (географічні координати) джерела (або декількох

джерел) точно відомі; б) застосування для випадків, коли місцезнаходження джерела невідоме.

До першого типу відносяться перш за все аварії на Чорнобильській АЕС (ЧАЕС) та Фукусімі, після яких було здійснено чимало досліджень із встановленням часової динаміки та вертикального розподілу викидів шляхом використання методів зворотного моделювання (наприклад, [17–18]). Слід зазначити, що попри великий обсяг досліджень, навіть оцінки загальної кількості викиду окремих радіонуклідів, отримані різними авторами, суттєво відрізняються. Наприклад, довірчий інтервал оцінок загального обсягу викиду Cs-137 після аварії на ЧАЕС наразі становить 70–130 ПБк [18], а аналогічний показник для аварії на АЕС Фукусіма становить 7–35 ПБк [18]. Зазначимо, що хоча оцінки обсягів викидів на АЕС Фукусіма майже на порядок менше відповідних оцінок викидів на ЧАЕС, співвідношення між максимальним і мінімальним значеннями наведених вище довірчих інтервалів у випадку АЕС Фукусіма більше у порівнянні з аналогічним значенням, отриманим для ЧАЕС (5 та 1,8 відповідно). Це свідчить про складність розв'язання обернених задач навіть у випадку точно відомого розташування джерела, яка пов'язана з поганою обумовленістю цих задач та з відповідною чутливістю розв'язку до припущень щодо першого наближення, наявних вимірів та похибок моделей.

При встановленні часової динаміки викидів із відомого джерела в оперативному режимі актуальною є задача використання вимірів потужностей доз замість концентрацій, оскільки вони наявні практично відразу під час аварії. Але при використанні таких вимірів треба оцінювати не тільки обсяги викидів та їх розподіл з висотою, але й радіонуклідний склад. Цьому класу задач були присвячені роботи [8, 19]. Закономірно, що при встановленні обсягів викидів за вимірами потужностей дози похибка оцінки збільшується у порівнянні з випадком використання вимірів концентрацій.

За останнє десятиріччя регулярно трапляються випадки детектування радіонуклідів в атмосфері антропогенного походження, джерела яких на момент детектування невідомі. Яскравим прикладом є виявлення радіоактивного йоду (І-131) над Європою восени 2011 року. Як показало дослідження [3], в якому були використані, зокрема, засоби оберненого моделювання, викид відбувся з Інституту ізотопів у Будапешті. З того часу цей випадок використовувався для перевірки методологій інверсії джерела. Нещодавно відбулося декілька інцидентів зі значним обсягом виявлення техногенних радіонуклідів, для яких не існує достовірної інформації про фактичне джерело викидів. Одним із таких є виявлення йоду в жовтні 2016 року, яке досліджувалось засобами оберненого моделювання у роботі [4]. У даній роботі не вдалося надійно встановити місцезнаходження джерела, хоча максимум імовірності викиду припадав на європейську частину Росії.

Виявлення I-131 у січні-лютому 2017 року викликало ще більше занепокоєння порівняно з випадком 2016 року. Як і у випадку детектування в 2016 р., дослідження [2] не прийшло до однозначних висновків про джерела викиду. Як зазначено у дослідженні «Виявлення нешкідливих рівнів I-131 у повітрі у січні/лютому 2017 р. в Європі відбулося в результаті поєднання кількох джерел та несприятливих метеорологічних умов» (переклад з англійської).

Мабуть, найбільш помітним виявленням радіонуклідів антропогенного походження у повітрі за останні роки був інцидент з рутенієм-106 (Ru-106) у вересні-жовтні 2017 р. [1]. Цей радіонуклід виключно антропогенного походження був виявлений на широкій території, що покривала більшу частину Євразії (рис. 2). За результатами оберненого моделювання, проведеного різними групами дослідників [6, 20], площа ймовірного розташування джерела охоплювала велику територію у центральній частині Росії (Уральський регіон, рис. 2). Але при цьому площа ймовірного розташування джерела за даними моделювання була на порядок менша за площу території, де був детектований рутеній-106 (більша частина Євразії). Найбільш імовірним джерелом викиду серед тих, що потрапляють в область імовірного розташування джерела, вважається підприємство з обробки радіоактивних відходів «Маяк», розташоване у Челябінській області, Російська Федерація [20].



Рисунок 2 – Місцезнаходження вимірів, де був виявлений Ru-106 у жовтні 2017 р. і просторовий розподіл максимальної кореляції між розрахованими концентраціями та вимірами у залежності від місця розташування джерела за даними роботи [6]

4. Інформаційні системи для аналізу та прогнозування атмосферних забруднень

4.1. Огляд існуючих систем прогнозування забруднення атмосфери

Інформаційні системи підтримки рішень у випадку екологічних аварій базуються на прогнозних оцінках розповсюдження ЗР в атмосфері та водному середовищі, які, у свою чергу, здійснюються на підставі математичних моделей, описаних у попередніх розділах. У галузі радіаційної безпеки відомими є такі системи, як система Євросоюзу з ядерного аварійного реагування РОДОС [21], американська система NARAC (https://narac.llnl.gov), українська система КАДО [22] та ін.

Найбільш складною за різноманітністю процесів розповсюдження, які описуються прогностичними моделями, є система РОДОС, що дозволяє розраховувати розповсюдження радіонуклідів в атмосфері, морських і річкових системах, через наземні, водні і харчові ланцюги живлення. Моделі системи РОДОС об'єднуються у ланцюги моделей. Початком ланцюгів моделей системи РОДОС є зазвичай розрахунок модуля атмосферного перенесення цієї системи. На підставі результатів МАП розраховуються часова динаміка випадінь і дози через харчові ланцюги живлення (модель FDMT). В іншому ланцюгу моделей із використанням результатів МАП, а також доданих прямих джерел потрапляння ЗР у водойми, розраховуються динаміка радіонуклідів у водоймах і відповідні дози від водних шляхів.

Сучасні веб-технології надають можливості побудови інформаційних систем прогнозування, доступних широкому колу експертів через мережу Інтернет. Однак веб-систем прогнозування, рівних за функціональними можливостями системі РОДОС, досі не створено. Наявні веб-системи дозволяють в оперативному режимі розв'язувати задачі моделювання атмосферного розповсюдження забруднень. Американська веб-система READY [23] використовує модель атмосферного розповсюдження HYSPLIT та надає веб-інтерфейс для прогнозування розповсюдження забруднень при аварійних викидах у будь-якій точці Земної кулі. Для розрахунків використовуються оперативні дані глобальної моделі прогнозування погоди GFS Американського Національного центру прогнозування довкілля NCEP (https://nomads.ncep.noaa.gov).

Українська веб-система «Повітря» представлена у роботі [9]. У ній використовується американська модель атмосферного розповсюдження CALPUFF (www.src.com), придатна для розрахунку розповсюдження забруднень на відстані від ~100 м до 1000 км. Система розраховує розповсюдження атмосферних забруднень від довільно розташованих джерел на території України (до 200 одночасно) на підставі деталізованих метеорологічних полів із просторовим дозволом 0,15 град., розрахованих системою прогнозування погоди WRF-Україна, встановленою для оперативного функціонування в Українському Гідрометцентрі. Система побудована на базі клієнт-серверної архітектури, де веб-сервер отримує запити на виконання розрахунків від користувачів, здійснює запити до бази даних, сервера прогнозування погоди та ініціює модель на розрахунковому сервері. Користувач отримує результати у вигляді графіків і карт на картографічній основі OpenStreetMaps. Усі розрахункові дані доступні для експортування в текстові файли.

4.2. Запропонована структура нової системи ідентифікації характеристик невідомих джерел атмосферного забруднення шляхом оберненого моделювання

Для ідентифікації джерела радіоактивного забруднення можливо використовувати систему РОДОС, яка була згадана вище і яка включає модель далекого транспорту МАТСН, здатну обчислити атмосферне транспортування радіонуклідів у глобальному масштабі. Автори [6] шукали у своїй роботі джерело рутенію за допомогою системи РОДОС. Як вхідні дані використовувалися глобальні дані прогнозу погоди, дані станцій забруднення та карта ядерних установок.

Але проводити подібні розрахунки на підставі системи РОДОС досить складно, оскільки кожен розрахунок оберненого перенесення для нового виміру шляхом розв'язання рівняння (7) потрібно запускати в ручному режимі, а отримані результати слід мінімізувати за допомогою стороннього програмного забезпечення для визначення регіону з імовірним місцем розташування джерела. Візуалізація даних на карті також здійснюється вручну за допомогою сторонніх програм.

Для автоматизації цього процесу доцільно використовувати веб-систему, яка буде приймати вхідні дані від користувачів, ініціювати обернені розрахунки моделі атмосферного перенесення шляхом розв'язання рівняння (8), обчислювати функцію «джерелорецептор» (11), мінімізувати функцію якості (2) та зберігати результати розрахунків (рис. 3). Цей поділ спростить створення кожного нового розрахунку та обробку результатів. Для автоматизації обернених розрахунків може виявитися більш зручним використовувати вільно розповсюджувану модель атмосферного перенесення, таку як FLEXPART, ніж систему РОДОС.

Обчислювальний сервер буде містити МАП для виконання обернених розрахунків, формування функції ДР та мінімізації функції якості. Тут буде встановлено автоматичний завантажувач даних глобального прогнозу погоди, який також повертатиме вітер кожного прогнозу для обернених обчислень. Після обчислення розрахована функція «джерело рецептор» зберігається на сервері у вигляді окремих файлів, які можуть бути експортовані користувачами (рис. 4), а також збережені в базі даних для побудови карти.



Рисунок 3 – Структура взаємодії компонентів веб-системи



Рисунок 4 – Блок-схема розрахунків

Розробка веб-системи базуватиметься на згаданій раніше системі «Повітря». Вебсервер керуватиме обчислювальним сервером, призначаючи йому завдання в режимі черги. Виконання завдань буде здійснюватися послідовно, передача вхідних даних, отримання результатів розрахунку, передача наступної частини вхідних даних і так далі у циклі. Для запуску розрахунку на обчислювальному сервері потрібні дані вимірів забруднення. Ці дані будуть передані у вигляді файла або введені через інтерфейс користувача. Через інтерфейс також передаються часові і географічні межі пошуку джерела викиду. Вхідні дані є ключовими для розрахунків, і допущені в них помилки можуть спричинити помилки в результатах розрахунків. Веб-сервер дозволить перевіряти їх одразу на веб-сторінці та відображати помилки користувачам, надсилаючи на обчислювальний сервер тільки правильні дані.

Після завантаження всіх результатів з обчислювального сервера на веб-сервер проводиться мінімізація. Це дозволить отриману область потенційних джерел відобразити на карті або у вигляді таблиці. Отримані вихідні дані знаходитимуться на веб-сервері, а отже їх можна завантажити в будь-який зручний час або внести зміни до раніше введених вхідних даних і знову запустити обчислення.

5. Висновки

У роботі проведено огляд методів ідентифікації невідомого джерела забруднення шляхом оберненого моделювання та інформаційних систем прогнозування й аналізу атмосферних забруднень. На підставі моделей атмосферного перенесення розроблено декілька відмінних закордонних та вітчизняних систем прогнозування атмосферних забруднень, наприклад, система Євросоюзу з ядерного аварійного реагування РОДОС. Але ключовими даними, які визначають якість прогнозування у таких системах, є характеристики джерела викиду. У випадку детектування забруднення від невідомого джерела викиду необхідно здійснювати обернене моделювання. Використання системи РОДОС, як і інших існуючих систем прогнозування, для такого завдання можливе, але потребує багаторазового ручного запуску моделей атмосферного перенесення в оберненому режимі розрахунків. Представлені у роботі результати застосування методів оберненого моделювання під час радіаційних інцидентів останнього десятиріччя показують, що сучасні методи оберненого моделювання достатньо розвинуті для того, щоб ставити задачу про автоматизацію оберненого моделювання в інформаційних системах аналізу і прогнозування атмосферних забруднень. Навіть при тому, що дані методи не завжди здатні точно вказати джерело викиду внаслідок браку вимірів та поганої обумовленості оберненої задачі атмосферного перенесення, їх застосування завжди приводить до істотного зменшення (на порядок і більше) області пошуку невідомих джерел у порівнянні з областю детектування забруднюючих речовин. На даний час в існуючих системах прогнозування методи оберненого моделювання автоматизовані лише частково, а саме для випадку відомого розташування та невідомих обсягів викидів джерела забруднень. Тому у даній роботі запропоновано архітектуру майбутньої системи ідентифікації невідомих джерел викидів шляхом оберненого моделювання.

подяки

Дана робота була підтримана грантом Національного фонду досліджень України № 2020.02/0048.

СПИСОК ДЖЕРЕЛ

1. Masson O., Steinhauser G., Zok D., Saunier O. et al. Airborne concentrations and chemical considerations of radioactive ruthenium from an undeclared major nuclear release in 2017. *Proc. of the National Academy of Science*. 2019. Vol. 116, N 34. P. 16750–16759. DOI: <u>10.1073/pnas.1907571116</u>. 2. Masson O., Steinhauser G., Wershofen H. et al. Potential Source Apportionment and Meteorological Conditions Involved in Airborne 1311 Detections in January/February 2017 in Europe. *Environmental Science & Technology*. 2018. Vol. 52, Issue 15. P. 8488–8500. DOI: <u>10.1021/acs.est.8b01810</u>.

3. Tichý O., Šmídl V., Hofman R., Šindelářová K., Hýža M., Stohl A. Bayesian inverse modeling and source location of an unintended 1311 release in Europe in the fall of 2011. *Atmos. Chem. Phys.* 2017. Vol. 17. P. 12677–12696. DOI: <u>10.5194/acp-17-12677-2017</u>.

4. Romanenko A.N., Kovalets I.V., Anulich S.N. Solution of the source identification problem with using the JRODOS MATCH. *Системи підтримки прийняття рішень. Теорія і практика (СППР 2017)*: зб. доповідей Одинадцятої наук.-практ. конф. з міжнар. участю (Київ, 5 червня 2017 р.). Київ, 2017. С. 66–69.

5. Enting I.G. Inverse problems in atmospheric constituent transport. Cambridge University Press, 2002. DOI: <u>10.1017/CBO9780511535741</u>.

6. Kovalets I.V., Romanenko O., Synkevych R. Adaptation of the RODOS system for analysis of possible sources of Ru-106 detected in 2017. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2020. Vol. 220–221.
P. 106302. ISSN 0265-931X. DOI: <u>10.1016/j.jenvrad.2020.106302</u>.

7. Tomas J.M., Peereboom V., Kloosterman A., van Dijk A. Detection of radioactivity of unknown origin: Protective actions based on inverse modelling. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2021. Vol. 235–236. P. 106643. ISSN 0265-931X. DOI: <u>10.1016/j.jenvrad.2021.106643</u>.

8. Kovalets I., Andronopoulos S., Hofman R., Seibert P., Ievdin I., Pylypenko O. Advanced Source Inversion Module of the JRODOS System. *Pollutants from Energy Sources. Energy, Environment, and Sustainability* / R. Agarwal, A. Agarwal, T. Gupta, N. Sharma (eds.). Springer, Singapore, 2019. P. 149–186. DOI: <u>10.1007/978-981-13-3281-4_10</u>.

9. Kovalets I.V., Maistrenko S.Y., Khalchenkov A.V., Zagreba T.A., Khurtsilava K.V., Anulich S.N., Bespalov V.P., Udovenko O.I. Povitrya web-based software system for operational forecasting of atmospheric pollution after manmade accidents in Ukraine. *Science and Innovation*. 2017. Vol. 13, Issue 6. P. 13–24. DOI: <u>10.15407/scin13.06.013</u>.

10. IAEA. Atmospheric Dispersion in Nuclear Power Plant Siting: A Safety Guide. *International Atomic Energy Agency*. Vienna, 1980. Safety series N 50-SG-S3.

11. Mikkelsen T. Atmospheric Dispersion: Basic. *Encyclopedia of Environmetrics* / A.H. El-Shaarawi, W.W. Piegorsch, M.A. Jenkins (eds.). 2006. DOI: <u>10.1002/9780470057339.vaa025m</u>.

12. Stohl A., Forster C., Frank A., Seibert P., Wotawa G. Technical note: The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2. *Atmos. Chem. Phys.* 2005. Vol. 5. P. 2461–2474. DOI: <u>10.5194/acp-5-2461-2005</u>.

13. Andronopoulos S., Davakis E., Bartzis J.G., Kovalets I. RODOS meteorological pre-processor and atmospheric dispersion model DIPCOT: a model suite for radionuclides dispersion in complex terrain. *Radioprotection*. 2010. Vol. 45, Issue 5. P. S77–S84. DOI: <u>10.1051/radiopro/2010017</u>.

14. Durran D.R. Numerical Methods for Fluid Dynamics: With Applications to Geophysics. Second Edition. Springer Science+Business Media, 2010. DOI: <u>10.1007/978-1-4419-6412-0</u>.

15. Janusz A. Pudykiewicz. Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters. *Atmospheric Environment*. 1998. Vol. 32, N 17. P. 3039–3050.

16. Marchuk G.I. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. Kluwer Academic Publishers, Dodrecht, Netherlands. 1996. DOI: <u>10.1007/978-94-017-0621-6</u>.

17. Davoine, X., Bocquet, M. Inverse modeling-based reconstruction of the Chernobyl source term available for long term transport. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*. 2007. Vol. 7, N 6. P. 1549–1564.

18. Liu Y., Haussaire J.M., Bocquet M., Roustan Y., Saunier O., Mathieu A. Uncertainty quantification of pollutant source retrieval: comparison of Bayesian methods with application to the Chernobyl and Fukushima Daiichi accidental releases of radionuclides. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. 2017. Vol. 143, Issue 708. P. 2886–2901. DOI: <u>10.1002/qj.3138</u>.

19. Saunier O., Mathieu A., Didier D., Tombette M., Quélo D., Winiarek V., Bocquet M. An inverse modeling method to assess the source term of the Fukushima nuclear power plant accident using gamma dose rate observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2013. Vol. 13, N 22. P. 11403–11421. DOI: 10.5194/acp-13-11403-2013.

20. Saunier O., Didier D., Mathieu A., Masson O., Dumont Le Brazidec J. Atmospheric modeling and source reconstruction of radioactive ruthenium from an undeclared major release in 2017. *Proc. of the Na*-

tional Academy of Sciences of the United States of America. 2019. Vol. 116 (50). P. 24991–25000. DOI: <u>10.1073/pnas.1907823116</u>.

21. Landman C., Päsler-Sauer J., Raskob W. The Decision Support System RODOS. *The Risks of Nuclear Energy Technology. Science Policy Reports* / G.K. Anke, V.F.H. Schlüter, W. Raskob, C. Landman, J. Päsler-Sauer (eds.). Berlin, Heidelberg: Springer, 2014. P. 337–348. DOI: <u>10.1007/978-3-642-55116-1_21</u>.

22. Бончук Ю.В., Талерко Н.Н., Кузьменко А.Г. Программный комплекс анализа дозиметрической обстановки при аварийных выбросах АЭС Украины. *Проблеми безпеки атомних електростанцій і Чорнобиля*. 2009. № 12. С. 30–38.

23. Rolph G., Stein A., Stunder B. Real-time Environmental Applications and Display system: READY. *Environmental Modelling & Software*. 2017. Vol. 95. P. 210–228. DOI: <u>10.1016/j.envsoft.2017.06.025</u>.

24. Talerko N. Mesoscale modelling of radioactive contamination formation in Ukraine caused by the Chernobyl accident. *Journal of Environmental Radioactivity*. 2005. Vol. 78, Issue 3. P. 311–329. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2004.04.008.

Стаття надійшла до редакції 14.09.2021