

ПРОДУКЦИОННАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ЗАГРЯЗНИТЕЛЯ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ АТМОСФЕРНЫХ ОСАДКОВ

Резчиков А.Ф.,

Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, Москва, Россия
rw4cy@mail.ru

Богомолов А.С., Лапковский Р.Ю., Кушников В.А.,

ФГБУН ФИЦ «Саратовский научный центр Российской Академии Наук», Саратов, Россия
bogomolov@iptmuran.ru, robitprv@gmail.com, kushnikoff@ya.ru

Шнайдер И.А.

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов, Россия
es1098@mail.ru

Аннотация. В статье изложены результаты создания математической модели для расчета и анализа процессов распространения атмосферных загрязнителей. Разработанная модель реализована в виде компьютерной программы, использующей замеры экомониторинга и метеоданные на заданной территории. Приведены результаты моделирования, расчеты и сравнительный анализ точности модели.

Ключевые слова: экология, поллютант, Гауссов шлейф, вымывание загрязнителя, имитационное моделирование.

Введение

К основным задачам экологического мониторинга наряду с контролем соблюдения нормы выбросов от инвентаризованных источников относится и обнаружение незарегистрированных ранее источников загрязнений. Появление таких источников усложняет как экологическую ситуацию в целом, так и экологический мониторинг, а равно и деятельность предприятий, не превышающих заявленных норм, в условиях достаточно тесного соседства различных источников загрязнений, соответственно решение задачи локализации может быть полезным как для промышленных предприятий, стремящихся соблюдать экологические нормы и уменьшить свой негативный след на окружающую среду, так и для государственных и негосударственных организаций, заботящихся о сохранении окружающей среды и здоровья населения.

При решении задач определения источников загрязнений применяется комплекс математических методов и моделей для расчета распространения загрязнителей. Влияние значительного числа различных факторов на распространение загрязнителя делает эту задачу весьма сложной и вызывает необходимость наложения некоторых ограничений на начальные условия.

Исследования по моделированию распространения загрязнений атмосферного воздуха продолжаются с 30-х годов прошлого столетия. Первые аналитические и приближенные решения были выведены при широком диапазоне упрощающих предположений в работах [1]—[2], где было рассмотрено решение уравнения переноса при различных краевых условиях и зависимостях. Наиболее распространенным и применяемым решением стала математическая модель Гауссова шлейфа, представляющая собой решение уравнение переноса при предположениях постоянной скорости и направления ветра. В модели предполагается нормальное распределение частиц поллютанта по трем осям. Значения дисперсии определяются на основании обобщения экспериментальных данных для различных метеорологических ситуаций.

Впоследствии были получены модификации модели Гауссова шлейфа и для более строгих начальных условий [3]. Также модель Гауссова шлейфа послужила основой для различных моделей и методов расчета концентраций загрязнителей атмосферного воздуха, полученных путем комбинации с другими подходами. Один из последних результатов описан в статье [4], где модель Гауссова шлейфа соединена с моделью PUFF-UAF, разработанной для расчета распространения вулканического пепла. Последняя модель основана на модели Лагранжа распространения частиц и позволяет более точно прогнозировать концентраций выбросов и локализовать их потенциальные источники.

Интенсивность выбросов точечного источника также может быть рассчитана с помощью метода последовательной функциональной аппроксимации [5]. Однако обладая данными наблюдений за достаточно длительный период можно оценить интенсивность возможного источника более простым способом, что было предложено в статье [6]. Авторы этой работы предлагают использовать для обработки данных длительных наблюдений улучшенную версию модели Гауссова шлейфа – модель Эрмака, позволяющую провести оценку интенсивности выбросов источника, рассчитав количество

осевшего за период загрязнителя. При этом авторами была выявлена линейная зависимость между количеством осевшего загрязнителя, наблюдаемой концентрацией и интенсивностью выбросов источника. В качестве исследуемой области была рассмотрена территория предприятия по переплавке цинка в Британской Колумбии. В процессе наблюдений была собрана информация по количеству осевшей на рецепторах в течение месяца цинковой пыли (в виде сульфата цинка) за два года, использованная затем в процессе моделирования. Также в статье была определена оптимальная величина временных отрезков для одного шага симуляции.

В настоящее время в РФ для целей нормирования вредного воздействия используются методики, перечисленные в приказе от 6 июня 2017 года N 273 «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе», при этом в методике расчета концентраций загрязнителя, выброшенного в атмосферу в результате деятельности точечного источника не учитывается влияние атмосферных осадков на облако шлейфа, а также не учитывается сухое осаждение частиц поллютанта. С целью разработки математического и программного обеспечения для развития и совершенствования отечественных конкурентоспособных систем экологического мониторинга, совершенствования методов расчета распространения атмосферных выбросов химических загрязнителей и определения местонахождения их источников в настоящей статье предлагается формальная постановка и подход к решению задачи локализации источников выбросов методами оптимизации и имитационного моделирования, сочетающий в себе ключевые преимущества полученных на сегодня результатов.

1. Постановка задачи локализации источников повышенного атмосферного выброса

Содержательно, пусть известно о превышении концентрации поллютанта p в некоторых рассматриваемых точках наблюдения на участке S . Также известны метеоданные на участке S и данные о сертифицированных источниках выброса рассматриваемого поллютанта, попадающего на участок S . Требуется определить местоположение на участке S новых возможных источников выброса, за счет действия которых наблюдалось указанное превышение.

Формально, пусть на участке промышленной территории S установлена система датчиков $\Sigma_i (1 \leq i \leq m)$ и известны:

1. данные метеонаблюдений $X(t)$ на отрезке времени $[t_n, t_k]$,
2. данные экологического мониторинга $G(t)$ на отрезке времени $[t_n, t_k]$,
3. W_0 – множество зарегистрированных источников загрязнения $w_i(x, y, z, Q) \in W_0$ на промышленной территории S и их характеристики $(x, y, z, -$ координаты местоположения, $Q(t)$ – задекларированная интенсивность выбросов).

Пусть также на датчике Σ_i наблюдается превышение средней концентрации загрязняющего вещества p ($1 \leq p \leq n$) на интервале $\Delta t \in [t_n, t_k]$. Требуется определить подмножество участков S_1, \dots, S_k территории S с наибольшей средней концентрацией вещества p на интервале Δt .

Под превышением средней концентрации будем понимать значение концентрации поллютанта p , превышающее некоторое известное значение, наблюдаемое ранее на отрезке времени $[t_n, t_k]$ или предельно допустимую концентрацию (ПДК) поллютанта p .

В предлагаемой постановке мы принимаем гипотезу, что участки S_1, \dots, S_k , где концентрация выброса была наибольшей, содержат искомые источники либо близки к искомым источникам выбросов.

Для дальнейшего корректного решения этой задачи в условиях воздействия на шлейф загрязнителя атмосферных осадков была разработана производственная модель расчета распространения поллютанта на основе модели Д. Эрмака.

2. Разработанная производственная модель

Влияние атмосферной влажности, вымывание шлейфа осадками, а также сухое осаждение частиц поллютанта под действием гравитации вызывают занижение предсказываемой концентрации на участках исследуемой области вблизи источника, и, соответственно, завышение на более удаленных участках. С целью повышения точности предсказания концентрации поллютанта на участке исследуемой области была разработана производственная модель расчета распространения загрязнителей с учетом влияния влажности и гравитации на формирование шлейфа. За основу была взята модель расчета шлейфа Д. Эрмака, учитывающая сухое осаждение загрязнителя (1):

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \times \exp\left(-\frac{W_{set}(z-H)}{2K_z} - \frac{W_{set}^2 \sigma_z^2}{8K_z^2}\right) \left[\exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) - \sqrt{2\pi} \frac{W_0 \sigma_z}{K_z} \exp\left(\frac{W_0(z+H)}{K_z} + \frac{W_0^2 \sigma_z^2}{2K_z^2}\right) \times \operatorname{erfc}\left(\frac{W_0}{\sqrt{2}K_z} + \frac{z+H}{\sqrt{2}\sigma_z}\right) \right], \quad (1)$$

где $W_{set} = \rho g d^2 / 18\mu$, — скорость витания сферических частиц по закону Стокса, где ρ — плотность частицы загрязнителя, d — диаметр частицы загрязнителя, g — ускорение свободного падения, μ — вязкость воздуха; $W_0 = W_{dep} - \frac{1}{2}W_{set}$, $W_{dep} > 0$ — скорость сухого осаждения частиц загрязнителя, получаемая экспериментальным путем.

Основным преимуществом подхода к решению обратной задачи с помощью модели Д. Эрмака является возможность расчета интенсивности неизвестного источника на основе данных о сухом осаждении загрязнителя. Масса осевшего загрязнителя является линейной комбинацией (2) интенсивности источника загрязнения Q и концентрации на t -м участке области поиска [6]:

$$D_t = W_{dep} A_t \Delta t \sum_{j=1}^{N_j} Q_j C_t, \quad (2)$$

где D_t — масса осевшего загрязнителя в кг, A_t — площадь t -го участка, Δt — временной интервал, Q_s — интенсивность выбросов j -го источника, $j=1, \dots, N_j$, N_j — число зарегистрированных источников, C_t — концентрация поллютанта на t -м участке, $t=1, \dots, N_j$, N_j — число участков координатной сетки области поиска. Обладая лишь данными наблюдений за концентрацией поллютанта на исследуемой территории за достаточно долгий период (год и более), массу сухого осаждения можно оценить с помощью различных методов, например применяемого в Великобритании CBED (Concentration Based Estimated Deposition) или метода роя частиц, примененного вкуче с экспоненциальными моделями расчета рассеивания загрязнителя.

Модель Д. Эрмака, несмотря на преимущества над моделью Гаусса, не учитывает влияние на распространение загрязнителя атмосферных осадков. Для учета влияния осадков на массу поллютанта в шлейфе используем некоторые факты из теории Кёлера и комбинацию уравнения Кельвина и закона Рауля [7]. Масса дроплета (сформировавшейся в облаке шлейфа капли конденсата, содержащего поллютант) диаметра d содержит n молей воды и n молей загрязнителя:

$$\frac{1}{6} \pi d^3 = m_w \vartheta_w + m_p \vartheta_p \quad (3)$$

Сухая масса частицы загрязнителя может быть найдена по формуле:

$$m_p = \frac{\pi}{6} \rho d^3 \quad (4)$$

Количество вещества загрязнителя есть:

$$\mu_p = \frac{m_p}{M_p} \quad (5)$$

Масса воды в дроплете может быть найдена по формуле:

$$m_w = \frac{RH * \vartheta_w * M_w}{1 - RH}, \quad (6)$$

где M_w — молярная масса воды, RH — относительная влажность воздуха.

Отсюда, общая масса дроплета:

$$m_s = \frac{RH * \vartheta_w * M_w}{1 - RH} + \mu_p M_p \quad (7)$$

Таким образом, концентрация поллютанта t -м участке может быть найдена с помощью выражения (8):

$$C(x, y, z) = \begin{cases} \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \times \exp\left(-\frac{W_{set}(z-H)}{2K_z} - \frac{W_{set}^2\sigma_z^2}{8K_z^2}\right) \\ \left[\exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) - \sqrt{2\pi} \frac{W_0\sigma_z}{K_z} \exp\left(\frac{W_0(z+H)}{K_z} + \frac{W_0^2\sigma_z^2}{2K_z^2}\right) \right. \\ \left. \times \operatorname{erfc}\left(\frac{W_0}{\sqrt{2}K_z} + \frac{z+H}{\sqrt{2}\sigma_z}\right) \right], \text{ без осадков;} \\ \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \times \exp\left(-\frac{W_{set}(z-H)}{2K_z} - \frac{W_{set}^2\sigma_z^2}{8K_z^2}\right) \\ \left[\exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) - \sqrt{2\pi} \frac{W_0\sigma_z}{K_z} \exp\left(\frac{W_0(z+H)}{K_z} + \frac{W_0^2\sigma_z^2}{2K_z^2}\right) \right] \times \\ \operatorname{erfc}\left(\frac{W_0}{\sqrt{2}K_z} + \frac{z+H}{\sqrt{2}\sigma_z}\right) \times \frac{6}{\pi\rho d^3} \left(\frac{RH*\vartheta_w*M_w}{1-RH} + \mu_p M_p \right), \text{ при осадках.} \end{cases} \quad (8)$$

Для реализации предложенного подхода была разработана, откалибрована и испытана реализация стационарной продукционной модели расчета распространения загрязнителя на высокоуровневом языке программирования Python.

3. Разработанное программное обеспечение

В проведенном исследовании использовались данные измерений экологической обстановки и погодных условий за последние 3 года с периодичностью замеров в 20 минут. Исследуемая область представляет собой участок промышленной территории вблизи населенного пункта размером 5 на 5 километров с преимущественно гладким рельефом. На участке расположены стационарные пункты экологического мониторинга $R_1...R_5$, отмеченные на картосхеме зелеными маркерами (Рис. 2), осуществляющие наблюдение за качеством воздуха путем измерения концентраций загрязняющих веществ, а также сбор следующих метеорологических данных: скорость и направление ветра, температура и влажность воздуха, атмосферное давление. Также на участке расположены зарегистрированные источники выбросов S_1, S_2, S_3 – промышленные предприятия по переработке нефти, очистные сооружения, склады химических реактивов и т.п. По данным предприятиям известны следующие задекларированные характеристики: местоположение, высота над уровнем суши, количество часов работы и интенсивность выбросов в атмосферу загрязняющих веществ. Известно, что на данном участке присутствуют иные промышленные объекты, которые потенциально могут быть источниками загрязнения.

Программа позволяет моделировать распространение загрязнителя атмосферы на исследуемой территории. Исследуемая область представляет собой участок промышленной территории размером 5 на 5 километров с преимущественно гладким рельефом (Рисунок 1).

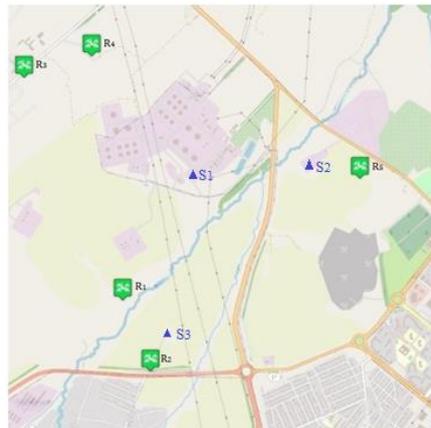


Рис. 1. Исследуемый участок промышленной территории

На участке расположены стационарные пункты экологического мониторинга $R_1...R_5$, осуществляющие наблюдение за качеством воздуха путем измерения концентраций загрязняющих веществ, а также метеорологических данных. Также на участке расположены зарегистрированные источники выбросов — промышленные предприятия по переработке нефти, очистные сооружения, склады химических реактивов и т.п. По данным предприятиям известны следующие задекларированные характеристики: местоположение, высота над уровнем суши, количество часов работы и интенсивность выбросов.

Программа состоит из следующих основных модулей.

- Модуль получения данных экологического мониторинга и погоды. Измеренные концентрации и некоторые данные о погоде выгружаются из реляционной базы данных путем отправки SQL-запроса и обращения к API онлайн-сервиса open-meteo.com.
- Конфигурационный файл для настройки параметров симуляции. Для каждой симуляции задаются: шаг координатной сетки, интенсивность выбросов зарегистрированных источников, их местоположение, временной интервал одной итерации, количество итераций.
- Модуль расчета параметров Гауссова распределения σ_x и σ_y . Параметры рассчитываются как функция от расстояния от точки пространства до местоположения источника загрязнения в зависимости от класса атмосферной стабильности на данной итерации.
- Модуль расчета концентрации загрязнителя в точке пространства на основе производственной модели. После расчета дисперсий значения подставляются в модели и рассчитываются для каждой точки координатной сетки.
- Модуль отрисовки для отображения результатов симуляции на схеме исследуемого участка промышленной территории и тепловой карте.
- Модель была откалибрована и протестирована с использованием реальных данных наблюдений за экологической обстановкой на исследуемом участке.

Данные о концентрациях в точках интереса записываются в Excel-файл. В отличие от других известных имплементаций экспоненциальных моделей распространения загрязнителя, в данной модели сделан ряд качественных улучшений. Так, значения влажности воздуха, наличие осадков, размывающих шлейф поллютанта и класс стабильности атмосферы не предполагаются неизменными в течение всей симуляции. Для повышения точности расчета класс стабильности определяется на каждой итерации на основе информации об инсоляции, времени суток и облачности на данном участке местности в заданный период времени, получаемой от API онлайн-сервиса open-meteo.com, а размывание шлейфа рассчитывается в зависимости от влажности воздуха и наличия атмосферных осадков.

В таблице 1 указаны значения постоянных модели.

Таблица 1. Постоянные параметры модели

Константа	Значение	Ед. изм.
Q_i (задекларированная интенсивность i -го источника)	[0.2193, 0.006, 0.011]	мг/с
H (задекларированная высота i -го источника)	[51.6, 33, 4]	м
W_{dep} (скорость сухого осаждения частиц сероводорода)	0.0732	м/с
P (плотность сероводорода)	1.36	кг/м ³

4. Полученные результаты моделирования

На рисунке 2 представлена отрисовка результатов моделирования распространения сероводорода производственной моделью без учета вымывания поллютанта осадками 1 Мая 2021. По данным метеонаблюдений, в течение суток наблюдались осадки в виде дождя, атмосфера была преимущественно сильно нестабильной (классы А–В).

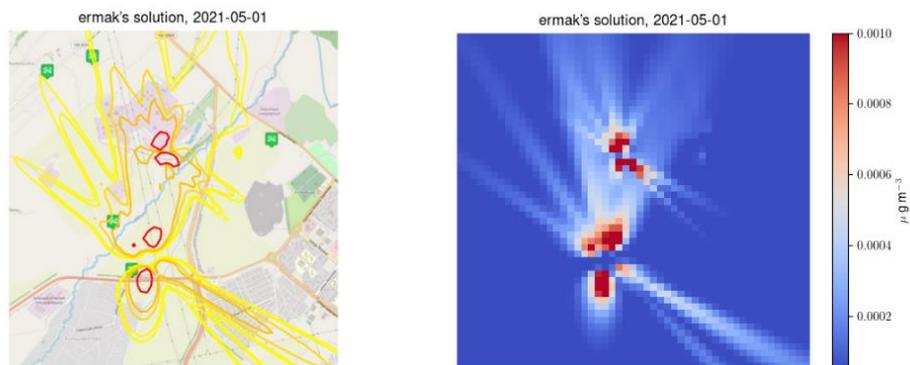


Рис. 2. Распространение сероводорода 1 Мая 2021 с учетом размывания шлейфа атмосферными осадками

Учет вымывания поллютанта из шлейфа позволяет уменьшить преувеличенную оценку, характерную для всех экспоненциальных моделей расчета распространения атмосферного загрязнителя на участках, удаленных от источника загрязнения. Как видно на отрисовке результатов, большее число близких к источнику участков имеют повышенную концентрацию поллютанта, что подтверждается и данными наблюдений экомониторинга на рассматриваемом участке.

Средняя абсолютная ошибка модели Эрмака с учетом размывания шлейфа составила $MAE = 0,000086$, средняя процентная ошибка – $MARE = 41,04\%$, без размывания $MAE = 0,000135$, $MARE = 48,51\%$. данные значения сопоставимы со средней наблюдаемой концентрацией сероводорода на исследуемом участке $c_{avg} = 0,0001 \text{ мг/м}^3$. Средняя процентная ошибка модели Д. Эрмака без учета влияния осадков получилась практически равной ошибке разработанной ранее реализации модели Гауссова шлейфа [8] – $MARE = 48,82\%$. На рисунке 3 представлена динамика абсолютной ошибки в пределах симуляции одних суток 1 мая 2021, наблюдаемый на 10-й итерации всплеск объясним низкой скоростью ветра, зафиксированной датчиком, послужившим источником данных, на данном временном отрезке.

В исследовании компьютерной реализации модели Д. Эрмака на примере расчета концентраций цинка на предприятии в Британской Колумбии (морской климат) [6] авторами были получены значения предсказываемой концентрации в 10–20% ($MARE = 80–90\%$) от наблюдаемых данных экомониторинга.



Рис. 3. Абсолютная ошибка моделей с учетом и без учета размывания в пределах одной симуляции

5. Обсуждение разработанной продукционной модели

Исследование результатов выявило ряд преимуществ и недостатков реализованной модели. К преимуществам можно отнести:

- эффективность и скорость вычислений – время одной симуляции не превышает одной минуты;
- учет влияния стабильности атмосферы и направления ветра на рассеивание загрязняющих веществ;
- учет влияния атмосферных осадков и вымывания загрязнителя;
- возможность использования для оценки приземных концентраций загрязняющих веществ на относительно больших территориях;
- возможность адаптации для моделирования различных типов загрязнителей и источников (аэрозоли, газы).

Ограничения модели:

- основным недостатком, характерным и для других экспоненциальных моделей распространения, является ограниченная применимость для расчета концентраций на участках, близких к источнику, а также снижение точности расчета при низкой (менее 1 м/с) скорости ветра;
- в модели не учитывается возможный сложный ландшафт местности или сооружения, которые могут влиять на рассеивание загрязняющих веществ, соответственно низкая применимость для случаев со значительным рельефом местности;
- не учитываются возможные химические реакции в облаке шлейфа с другими загрязнителями.

6. Заключение

В статье предлагается формальная постановка и подход к решению задачи локализации новых источников повышенного выброса загрязнителей. В рамках предлагаемого подхода на основе математической модели расчета шлейфа Д. Эрмака построена модель, отличающаяся учетом размывания шлейфа загрязнителя атмосферными осадками. Разработанная модель реализована в виде компьютерной программы, позволяющей на основе реальных данных измерений экологической обстановки и погодных условий по заданному участку местности для каждой итерации симуляции в автоматизированном режиме. Результаты данного исследования имеют важное практическое значение и послужат основой для разработки автоматизированной системы определения местоположения незарегистрированных источников загрязнения на промышленной территории, а также могут быть внедрены для прогнозирования уровня загрязнения атмосферы и оценки эффективности принимаемых мер.

Литература

1. *Roberts O.F.T.* The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character.* – 1924. – Vol. 104, Iss. 728. – P. 640–654, 1924.
2. *Sutton O.G.* A theory of eddy diffusion in the atmosphere // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character.* – 1932. – Vol. 135, Iss. 826. – P. 143–165.
3. *John M. Stockie.* The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modeling // *SIAM Review.* – 2011. – Vol. 53, No. 2. – P. 349–372.
4. *Jooyong Lee, Sungsu Lee, Hyun A. Son, Waon-ho Yi.* Development of PUFF–Gaussian dispersion model for the prediction of atmospheric distribution of particle concentration // *Scientific Reports.* – 2021. – Vol. 11, No. 6452.
5. *Чубатов А.А., Кармазин В.Н.* Устойчивая оценка интенсивности источника загрязнения атмосферы на основе метода последовательной функциональной аппроксимации // *Компьютерные исследования и моделирование.* – 2009. – №1. – С. 391–403.
6. *Enkeleida Lushia, John M. Stockie.* An inverse Gaussian plume approach for estimating atmospheric pollutant emissions from multiple point sources // *Atmospheric Environment.* – 2010. – Vol. 44, No. 8. – P. 1097–1107.
7. *Assou M., Saadeddine S.* Effect of the relative humidity on an industrial plume behavior // *Global NEST Journal.* – 2006. – Vol 8, No 3. – P. 297–305.
8. *Shnaider I., Bogomolov A., Lapkovsky R., Kushnikova E.* An Approach to Locating Unknown Sources of Increased Air Emissions // *2023 16th International Conference Management of large-scale system development (MLSD).* – 2023. – P. 1–5.