

Ю. А. Тунакова, Р. А. Шагидуллина, С. В. Новикова,
Ю. А. Шмакова, Э. В. Гоголь, А. Т. Галиева

МОДЕЛИ ПРОГНОЗА УРОВНЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПРИЗЕМНОГО СЛОЯ АТМОСФЕРЫ В ЗОНАХ ДЕЙСТВИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ПРОИЗВОДСТВ

Ключевые слова: полимерные производства, прогноз уровня загрязнения, качество атмосферного воздуха.

Проводится критический анализ с описанием преимуществ и недостатков существующих моделей расчета рассеивания примесей, поступающих из стационарных источников загрязнения, действующих в зоне концентрации полимерных производств.

Key words: Polymeric manufactures, the forecast of a level of pollution, quality of atmospheric air.

The critical analysis with the description of advantages and lacks of existing models of calculation of dispersion of the impurity acting from stationary sources of pollution, working in a zone of concentration of polymeric manufactures is carried out.

Рассмотренные нами в предыдущих публикациях [1,2] особенности действия стационарных источников загрязнения атмосферного воздуха, действующих в зонах концентрации полимерных производств, обуславливают ряд требований к выбору моделей расчета рассеивания примесей. Для обоснованного выбора модели для решения конкретных задач необходимо провести классификацию и критический анализ моделей в каждой из выделенных групп.

Характер моделей определяется, с одной стороны, кругом задач, а с другой – требованиями к точности моделирования. Разнообразие требований к характеру оценок загрязнения и высокая специфичность распространения выбросов от стационарных источников выбросов полимерных производств в различных метеоусловиях позволяет выделить следующие модели прогнозирования уровней загрязнения.

1. *Штатные модели ГГО (Главная геофизическая обсерватория им. А.И.Воейкова).* Стандартная методика основана на эмпирических моделях, позволяющая определить максимально возможную зону воздействия при выбросах загрязняющих веществ.

Достоинства:

Простота и скорость расчетов.

Недостатки:

Модель указывает не на реальное положение «облака» выбросов в тот или иной момент времени, а обозначает границы, в пределах которых концентрация загрязняющих веществ может достичь значительного превышения значений предельно-допустимых концентраций при неблагоприятных метеоусловиях.

2. *Стандартные модели.* Модели загрязнения атмосферы, основанные на методике ОНД-86. Модели могут быть использованы для анализа квазистационарных процессов, когда характерные времена выбросов токсичных веществ превышают характерные времена перемещения воздушных масс в анализируемой области пространства (например, случаи аварийных выбросов).

Достоинства:

Модель эмпирическая и позволяет рассчитать установившееся распределение концентраций примесей при заданном направлении и скорости ветра и максимально неблагоприятном с точки зрения рассеивания примесей сочетании метеопараметров.

Недостатки:

Низкая точность из-за слишком «жесткой» структуры и большого количества принимаемых упрощений. Попытка решить эту проблему при помощи введения многочисленных уточняющих коэффициентов не дает желаемого результата.

3. *Модели МАГАТЭ* (международный стандарт) для расчетов загрязнений атмосферы, создаваемых стационарными источниками примесей. Это наиболее полные эмпирические модели.

Достоинства:

Характер их детализации позволяет учитывать особенности местных метеорологических условий и производить расчеты распределений концентрации примесей в текущих метеоусловиях.

Недостатки:

Модели требуют значительных работ по привязке к условиям местности.

4. *Модели для экспресс-прогноза.* Простейшие нестационарные модели для расчета распространения «облака» загрязняющих веществ, предназначенные для экспресс-прогноза, которые строятся на основе методик и моделей МАГАТЭ.

Достоинства:

Позволяют рассчитать траекторию и время движения «облака» выбросов до потери токсичности или в интересующей области в текущих метеоусловиях.

Недостатки:

Установившихся стандартов на такие модели нет.

5. *Квазитрехмерные модели,* основанные на использовании полуэмпирических моделей МАГАТЭ с решением уравнения переноса-диффузии примесей в приземном слое. Нестационарные модели загрязнения, учитывающие неоднородность подстилающей поверхности. Для повышения скорости и точности вычислений использованы высокоэффективные численные методы и учтена специфика решаемой задачи.

Достоинства:

Используются в случаях, когда необходимо учесть неоднородность подстилающей поверхности, а вычислительные ресурсы и/или недостаток информации не позволяют использовать какие либо другие модели.

6. *Модели, основанные на решении задач мезометеорологического прогноза и решении трехмерного уравнения переноса диффузии примеси.* Наиболее полные и совершенные нестационарные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере, в которые включены расчеты мезометеорологических характеристик атмосферы с учетом орографии (рельеф местности).

Достоинства:

Использование моделей этого класса оправдано, когда от результатов экспертизы зависит безопасность работающих или проживающих в зоне воздействия, а специфика метеоусловий и орография местности таковы, что перечисленные выше модели неприменимы. Например, экспертиза проектов с прогнозом возможных событий, чреватых аварийными последствиями

Недостатки:

Требуют значительных вычислительных ресурсов и подробного задания больших объемов входной информации.

7. *Статистические модели прогнозирования, позволяющие получать значения будущих временных серий на основе их предыдущих показателей.* К этой группе моделей можно отнести авторегрессию, а также модель Бокса-Дженкинса (BJ) авторегрессию скользящего среднего (АРСС), наиболее полно и экономно выражающая автокорреляционные свойства стационарного временного ряда x_t . Записывается модель АРСС(p,q) следующим образом:

$$x_t = \varphi_1 x_{t-1} + \dots + \varphi_p x_{t-p} + \varepsilon_t - \theta_1 \varepsilon_{t-1} - \dots - \theta_q \varepsilon_{t-q},$$

где ε_t — случайная компонента, интерпретируемая как ошибка прогнозирования на шаг вперед, со средним значением (математическим ожиданием) ноль и дисперсией s^2 ; p — порядок авторегрессии; q — порядок скользящей средней. Применение модели АРСС возможно и в случае нестационарных рядов, характеризующихся наличием полиномиального тренда. Тогда от нестационарного ряда переходят к стационарному путем построения модели АРСС для разностей исходного ряда соответствующего порядка d. Порядок разностей d зависит от порядка полинома. Такую модель называют интегрированной (или проинтегрированной) моделью авторегрессии скользящего среднего и кратко записывают как АРИСС (p,d,q) или АРПСС (p,d,q) (в английской версии — ARIMA (p,d,q)) [14].

Недостатки:

Необходимость сбора большого количества данных и отсутствие физической интерпретации.

8. *Модели, позволяющие учесть процессы химической трансформации групп суммации загрязняющих веществ, т.е. суммарное влияние нескольких разных веществ.*

Достоинства:

Используется в тех случаях, когда для анализа события существенным является учет химических реакций, протекающих в «облаке» выбросов.

Недостатки:

Использование данной модели может значительно, в несколько раз, увеличивает время получения результата.

9. *Комплекс статистических моделей и автоматизированного прогнозирования неблагоприятных метеорологических условий (НМУ), предназначенный для оценки и прогнозирования уровня загрязнения атмосферного воздуха, а также принятия оперативных и плановых решений по управлению качеством воздушного бассейна.* Для получения методик с высоким качеством прогнозирования необходимы исследования по диагностике процессов, приводящих к реализации НМУ, и на основе этих исследований создание классификации данных процессов. Разработка расчетных моделей базируется на многомерном статистическом аппарате.

Достоинства:

Построение прогностических зависимостей основано на теории решения некорректных задач, что позволяет получать устойчивые решения при наличии коррелированности параметров, описывающих метеорологическую ситуацию.

10. Модели с искусственным интеллектом.

По сравнению с расчетными моделями, способны адаптироваться в изменяющихся природных условиях. Учитывают как априорную, так и апостериорную информацию об исследуемом объекте, позволяют использовать не только классический математический аппарат, но и возможности современных ЭВМ по моделированию работы человеческого мозга. В результате позволяют получить более высокую точность и адекватность, чем расчетные методы. Кроме того, результаты, получаемые по данным моделям, значительно легче интерпретируются человеком — исследователем.

10.1 Модели с нечеткой логикой.

Нечеткая логика - это обобщение традиционной Аристотелевой логики на случай, когда истинность рассматривается как лингвистическая переменная, принимающая значения типа: "очень истинно", "более-менее истинно", "не очень ложно" и т.п. Задание значения переменной словами, без использования чисел, для человека более естественно. Известно, что для решения прикладных экологических задач, широко используются лингвистические переменные, например, при прогнозе уровня загрязнения: «низкий», «средний», «высокий», «экологическое бедствие»; при расчете относительных экологических показателей: «очень низкий», «низкий», «ниже среднего», «средний», «выше среднего», «высокий», «очень высокий». Понятие лингвистической переменной играет важную роль в нечетком логическом выводе и принятии управленческих решений.

Основным направлением применения нечетких множеств в экологическом прогнозировании является иерархический нечеткий логический вывод. Основой для проведения операции нечеткого логического вывода является база правил, содержа-

щая нечеткие высказывания в форме "Если-то" и функции принадлежности для соответствующих лингвистических термов [15].

Достоинства.

Возможность оперирования не точными числовыми значениями, а некоторыми нечеткими лексическими переменными, так широко распространенными в экологических оценках и прогнозах.

Недостатки.

Необходимость привлечения экспертов для задания функций принадлежности и правил нечеткого вывода, что влечет за собой возможность ошибок вследствие «человеческого фактора».

10.2. Искусственные нейронные сети. Все искусственные нейронные сети, так же, как мозг человека, состоят из большого числа связанных между собой однотипных элементов – нейронов, которые имитируют нейроны головного мозга.

Нейрон состоит из элементов трех типов: умножителей (синапсов), сумматора и нелинейного преобразователя. Синапсы осуществляют связь между нейронами, умножают входной сигнал на число, характеризующее силу связи, (вес синапса). Сумматор выполняет сложение сигналов, поступающих по синаптическим связям от других нейронов, и внешних входных сигналов. Нелинейный преобразователь реализует нелинейную функцию одного аргумента – выхода сумматора. Эта функция называется функцией активации или передаточной функцией нейрона. Нейрон в целом реализует скалярную функцию векторного аргумента. Математическая модель нейрона выглядит следующим образом:

$$s = \sum_{i=1}^n w_i x_i + b,$$

$$y = f(s),$$

где w_i – вес синапса, $i=1...n$; b – значение смещения; s – результат суммирования; x_i – компонент входного вектора (входной сигнал), $i=1...n$; y – выходной сигнал нейрона; n – число входов нейрона; f – нелинейное преобразование (функция активации). Совокупность таких искусственных нейронов связывается в некую статичную структуру – нейронную сеть. Свойства сети будут определяться ее топологией, типом активационной функции и весами синапсов.

В настоящее время для расчета полей концентраций примесей наиболее активно используются нейронные сети типа многослойный персептрон [16-17].

Достоинства:

Возможность использования неточных и неполных данных в качестве исходных величин. Адаптация модели к конкретным физико-географическим, метеорологическим и др. условиям в процессе обучения.

Недостатки:

Жесткая привязка обученной модели к конкретной территории, на которой проводилось обучение сети.

10.3. Гибридные интеллектуальные структуры.

Большие перспективы сулит создание и использование моделей, сочетающих в себе свойства сразу нескольких инновационных подходов к прогностическому моделированию. Ярким примером такой гибридной системы могут служить нечеткие нейронные сети. Нечеткие нейронные сети (fuzzy-neuralnetworks) осуществляют выводы на основе аппарата нечеткой логики, однако параметры функций принадлежности настраиваются с использованием алгоритмов обучения нейросетей. Наибольшее распространение в настоящее время получили архитектуры нечеткой нейронной сети вида Мамдани-Заде, ANFIS (AdaptiveNetworkbasedFuzzyInferenceSystem) и Такаги-Сугено-Канга (TSK) [18,19]. Доказано, что такие сети являются универсальными аппроксиматорами.

Достоинства:

Сочетание количественного расчета рассеивания примесей с его качественной интерпретацией. Возможность оптимизации модели за счет обучения квазинейросетевой структуры.

Недостатки:

Обусловлены недостатками нейросетевых и нечетких моделей в отдельности.

Перечисленные модели можно классифицировать как эмпирические или теоретические [3].

Эмпирическими являются и модели, созданные в ГГО [3-12]. Именно эти эмпирические модели являются утвержденными на государственном уровне для практического использования. Фундаментальные теоретические модели в настоящее время используются только для научных целей, они позволяют только качественно объяснить некоторые наблюдаемые эффекты.

Существуют и полуэмпирические модели. Эти модели дополнены довольно развитым математическим аппаратом, что позволяет анализировать достаточно сложные ситуации, значительно отличающиеся от исходных экспериментов, и фактически объединять результаты разнородных экспериментов, например метеорологических и диффузионных. В этом главное отличие от чисто эмпирических моделей, которые описывают весь процесс в целом: на входе - параметры выброса, на выходе - концентрация в данной точке пространства.

Примером такой модели является *квазитрехмерная модель* [3]. В этой модели в явном виде учитывается распределение ветра и коэффициента диффузии по высоте. Это сделано для того чтобы добиться соответствия диффузионных моделей эмпирическим. Особую роль такой учет играет при интересующем нас моделировании распространения примесей в приземном слое, то есть на высотах менее 50 метров. Общим недостатком такого рода моделей является их преимущественно исследовательская направленность, в связи с чем они не рекомендуются для практического использования.

Также к полуэмпирическим можно отнести нейросетевые и нейронечеткие модели.

Вторым признаком для классификации является разнообразие учитываемых в модели физических процессов. В эмпирических моделях зачастую физика процессов почти не учитывается или сильно

искажается. Так, эмпирические модели с гауссовым распределением концентрации в струе и близким к линейному закону расширения струи (то есть практически все эмпирические модели) не могут быть проинтерпретированы как диффузионные [3].

В более сложных моделях учитывают законы движения воздуха и диффузии, причем используют очень разные наборы упрощающих предположений. Почти все модели распространения дополняются учетом специальных процессов, таких как начальный подъем нагретых выбросов, оседание тяжелых частиц, вымывание примесей осадками. Важную роль играет также учет химических превращений веществ в процессе распространения, в частности модели фотохимического смога.

Третьим признаком для классификации является тип используемого математического аппарата. В значительной мере он связан с первым признаком и еще более непосредственно - со вторым. Эмпирические модели используют явные формулы, которые при реализации на компьютере не вызывают никаких затруднений, трудоемким является только ввод и вывод информации. Полуэмпирические модели содержат уже процедуры численного решения дифференциальных уравнений в частных производных. Теоретические же модели чрезвычайно разнообразны по использованному математическому аппарату.

Следует, однако, отметить, что для экологического прогностического моделирования, где действует множество неформализуемых и малоизученных факторов, исходная информация часто бывает неточной и неполной, а лицо, принимающее решение, оперирует качественными оценками исследуемых объектов, наиболее подходящими можно считать модели с искусственным интеллектом. Такие модели, обеспечивая высокую точность прогнозов, не требуют сложных математических вычислений и нетребовательны к составу исходных данных. На основе таких моделей могут быть разработаны высокоэффективные автоматизированные вычислительные комплексы для систем поддержки принятия решений.

Литература

1. Тунакова Ю.А., Новикова С.В., Шагидуллина Р.А., Шмакова Ю.А. Вестник Казанского технологического университета, 12, 71-74 (2012).
2. Тунакова Ю.А., Новикова С.В., Шагидуллина Р.А., Шмакова Ю.А. Вестник Казанского технологического университета, 13, 183-188 (2012).

3. Замай С.С., Якубайлик О.Э. Модели оценки и прогноза загрязнения атмосферы промышленными выбросами в информационно-аналитической системе природоохранных служб крупного города: Учеб. пособие / Изд-во Красноярского гос. ун-та. Красноярск, 1998. 109 с.
4. Методика расчета концентрации в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий. ОНД-86.Л.: Гидрометеоздат, 1987, 94 с.
5. Методика определения выбросов автотранспорта для проведения сводных расчетов загрязнения городов (утверждена приказом Госкомэкологии России № 66 от 16 февраля 1999 г.). – СПб.: НИИ Атмосфера. –16 с.
6. Методика определения массы выбросов загрязняющих веществ автомобильными средствами в атмосферный воздух./Гос.НИИавтомобтрансп. (НИИАТ). - М.,1993. - 22 с.
7. Методика оценки воздействия промышленных предприятий на окружающую среду по техногенным факторам. - М.: ЭкоНИИПроект, 1992. - 115 с.
8. Методика расчетов выбросов в атмосферу загрязняющих веществ автотранспортом на городских магистралях. - М.: Изд-во Минтранспорта РФ. - 1997. - 55 с.
9. Методические основы оценки и регламентации антропогенного влияния на качество поверхностных вод. Л.: Гидрометеоздат. 1987.
10. Методические рекомендации по геохимической оценке загрязнения территории городов химическими элементами. - М.: ИМГРЭ, 1982. - 112 с.
11. Методические указания по оценке воздействия на окружающую среду объектов транспортно-дорожного комплекса. - М.: НИИАГ, 1995. - 23 с.
12. Методические указания по прогнозированию загрязнения воздуха в городах с учетом метеорологических условий. РД 52.04.78-86. - М.: Госкомгидромет. СССР, 1986.
13. Методические указания по расчету выброса вредных веществ автомобильным транспортом. М.: Гидрометеоздат, 1983. - 22 с.
14. Строгонов А.В. Компоненты и технологии №8, 2005г. 20 с.
15. Zadeh L.A. Fuzzy sets. — Information and Control, 1965, vol.8, N 3, pp.338-353.
16. Новикова С.В., Тунакова Ю.А., Исмаилова Е.С. Актуальные экологические проблемы Республики Татарстан (Казань, АН РТ, октябрь 11-14, 2008) Казань, 2008, С. 97-100.
17. Новикова С.В., Тунакова Ю.А., Исмаилова Е.С., Гарев Р.Х. Техносферная безопасность (Ростов-на-Дону-Шепси, сентябрь 9-13, 2008).
18. Тарков М.С. Нейрокомпьютерные системы. БИНОМ. Лаборатория знаний, Интернет-университет информационных технологий - ИНТУИТ.ру, 2006
19. Ярушкина Н.Г. Основы теории нечетких и гибридных систем М.: Финансы и статистика, 2004.

© Ю. А. Тунакова – д-р хим. наук, проф., зав. каф. общей химии и экологии КНИТУ им. А.Н. Туполева-КАИ, juliarprof@mail.ru; Р. А. Шагидуллина – канд. хим. наук, нач. управления государственной экологической экспертизы и нормирования воздействия на окружающую среду Мин-ва экологии и природных ресурсов РТ, Raisa.Shagidullina@tatar.ru; С. В. Новикова – канд. техн. наук, доц. каф. прикладной математики и информатики КНИТУ им. А.Н. Туполева-КАИ; Ю. А. Шмакова – асп. каф. технологии пластических масс КНИТУ; Э. В. Гоголь – д-р хим. наук, проф., зав. каф. общей химии и экологии КНИТУ им. А.Н. Туполева-КАИ; А. Т. Галиева – асп. той же кафедры.