

УДК 681.2:543.08.089.6

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

МЕТОДЫ РАСЧЕТА РАССЕЙВАНИЯ ПРИМЕСЕЙ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КАЧЕСТВА АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА В ЗОНАХ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ ПРОИЗВОДСТВ

Ключевые слова: полимерные производства, прогноз уровня загрязнения, атмосферный воздух, нейронные сети.

Проводится критический анализ с выявлением недостатков существующих методов расчета рассеивания примесей, поступающих из стационарных источников загрязнения. Приводятся возможности моделей расчета рассеивания примесей для стационарных источников загрязнения, действующих в зоне концентрации полимерных производств.

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

The critical analysis with revealing lacks of existing of calculation methods of dispersion of the impurity acting from stationary sources of pollution is carried out. Opportunities of models of calculation of dispersion of impurity for the stationary sources of pollution working in a zone of concentration of polymeric manufactures are resulted.

Введение

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 модели расчета рассеивания примесей. Для обоснованного выбора модели для решения конкретных задач необходимо провести классификацию и критический анализ моделей в каждой из выделенных групп.

Анализ существующих моделей расчета

По объекту исследования модели делятся:

1) Рецепторные модели, которые рассматривают измеренные концентрации загрязняющих веществ (ЗВ) в рецепторной точке и оценивают процентный вклад различных источников в формирование концентрации загрязняющих веществ (ЗВ) [3].

2) Модели, характеризующие действующий источник загрязнения – зависят от данных о количестве выбросов из источников загрязнения, метеорологических условий рассеивания:

- а) для стационарных источников;
- б) для динамичных источников (транспорт)

[4].

в) гибридные модели – скрещивание моделей источника и рецептора для выявления не зафиксированных официально выбросов [3].

Модели делятся:

По используемой системе координат.

1) Эйлеровы модели, в которых система координат определена относительно земной поверхности. В этом случае последовательность различных воздушных частиц определяется так, будто они переносятся воздушным потоком за наблюдателем, который закреплен на земной поверхности;

2) Лагранжевы модели, которые используют систему координат, движущуюся вместе с потоком воздуха, т.о. поддерживая контакт наблюдателя в

течение продолжительного периода времени. Данные модели либо отслеживают процессы в движущихся массах воздуха, либо используют условные частицы для имитации процессов рассеивания [3].

По механизмам рассеивания, взятым за основу.

- 1) Уравнение переноса примеси – является первичной и наиболее упрощенной моделью математического расчета рассеивания. В данной модели предполагается, что, диффузное расширение облака, химическое преобразование и гравитационное оседание примеси равно нулю или линейно относительно расстояния переноса.

Достоинства:

- такие модели удобно использовать для изучения влияния источников выбросов оксида углерода и твердых примесей на большие территории;
- возможность комбинировать данную модель с другими (особенно при использовании системы координат Лагранжа).

Недостатки:

- недопустимо использовать для учета рассеивания химически активных примесей [3];
- отсутствует учет метеорологических параметров, диффузного расширения и химического преобразования примеси, что ставит под сомнение полученные результаты по концентрациям ЗВ вблизи источника.

- 2) Регрессионные методы. Например, для прогноза уровня загрязнения SO₂ используется регрессионное уравнение вида:

$$S = f(K_p), \quad (1)$$

где S – концентрация SO₂, f – функция регрессии, K_p – некоторый комплексный метеорологический индекс:

$$K_p = \frac{\Delta P + 1.25 \Delta H}{\gamma - 1.5} \quad (2)$$

где ΔP , ΔH – разности давления и геопотенциала на уровне Земли и на поверхности 850 гПа,
 γ – вертикальный градиент температуры;

- 3) Метод разложения метеорологических полей по естественным ортогональным составляющим:

$$\xi(x, t) = \bar{\xi}(x) + \sum_{i=1}^k \alpha_i(t) \varphi_i(x) \quad (3)$$

где x – метеорологический параметр, $\bar{\xi}$ – среднее значение метеоэлемента, φ_i – ортогональные функции, зависящие от пространственных координат, часто связывают регрессионными соотношениями с характеристиками подстилающей поверхности, α_i – зависящие от времени коэффициенты разложения, связывают с крупномасштабными метеопараметрами;

- 4) Авторегрессионные методы:

$$y(t) = \sum_{i=1}^n \alpha_i y(t-i) + \beta \quad (4)$$

для анализа изменения во времени метеопараметров или показателей загрязнения атмосферы, значение которых в данный момент времени $y(t)$ зависит от значений этого параметра в предыдущие моменты времени.

5) Гауссовы модели, в соответствии с которыми распределение концентраций характеризуется как гауссово в горизонтальном и вертикальном направлениях. Эта модель, возможно, одна из самых старых (применяется приблизительно с 1936 г.), и наиболее часто используемая при вычислении концентраций ЗВ. Гауссовы модели описаны в [5] и в [6].

Рассматривается некоторое множество частиц вещества, выбрасываемых из точечного источника. Учитывая наличие турбулентных флуктуаций, распределение этих частиц в момент времени T можно записать следующим образом:

$$\sigma^2(T) = \bar{X}^2 \quad (5)$$

где X – расстояние от центра пучка частиц.

Скорость изменения величины X^2 выражается как

$$\frac{d\bar{X}^2}{dt} = 2\bar{X} \frac{d\bar{X}}{dt} = 2\bar{X} u' \quad (6)$$

где u' – турбулентная флуктуация ветра, скорость частиц под его действием изменяется мгновенно. Эта скорость может быть выражена через скорость ветра на последовательных временных интервалах:

$$\frac{d\bar{X}^2}{dt} = 2 \int_0^t \overline{u'(t)u'(t+\xi)} d\xi \quad (7)$$

В предположении однородности и устойчивости атмосферы усредненные характеристики можно считать однородными в пространстве и устойчивыми во времени. Коэффициент корреляции и дисперсию можно выразить как

$$R(\xi) = \frac{\overline{u'(t)u'(t+\xi)}}{u'^2} \quad (8)$$

и

$$\sigma^2(T) = 2\bar{u}'^2 \int_0^T \int_0^t R(\xi) d\xi dt \quad (9)$$

соответственно.

Для вычисления концентрации следует взять гауссово распределение со стандартными отклонениями s_x, s_y, s_z . Гауссовы модели с различными способами задания s_x, s_y, s_z имеют свои названия. Например, модель Пасквилла-Бриггса, модель Пасквилла-Гиффорда [5-6].

Достоинства:

- простота расчета и высокая точность при достаточно простой параметризации всего многообразия влияющих факторов.

- данная модель дает удовлетворительную аппроксимацию для расстояний до 20 км, а при некоторой доработке (учет зависимости концентраций ЗВ от времени присутствия примесей в атмосфере) – для больших расстояний (до 120 км) [4].

- возможность дальнейших модификаций формулы (учет устойчивости атмосферы, условий застройки, химического распада соединений) [3].

Недостатки:

- используются осредненные по слою диффузии значения метеорологических параметров.

- отмечаются значительные упрощения, связанные с учетом подстилающей поверхности (не учитывается диффузия холмистой местности и водоемов, «заградительная» функция зданий), в связи с этим ставится под сомнение справедливость данных, полученных в непосредственной близости от источников [7,8].

6) Метод Монте-Карло (стохастический метод), который основан на построении траекторий ансамбля случайно блуждающих частиц [7].

Достоинства:

- позволяют определять удельную плотность загрязнения атмосферы;

- высокая точность прогноза

Недостатки: данные модели могут достаточно точно спрогнозировать концентрации ЗВ лишь по одной траектории воздушной частицы. Однако при необходимости изучить динамику загрязняющих веществ всего региона, представляется нерациональным расчет тысяч подобных траекторий.

7) Модель градиентного переноса – математическая схема теории заимствована из физики тепло- и электропроводности. Уравнение показывает, что изменение концентрации в одномерном случае зависит от степени его градиента и некоторой постоянной, которая в атмосфере называется коэффициентом диффузии. С точки зрения градиентного переноса, диффузия в фиксированной точке пропорциональна градиенту концентрации [6-8]):

$$\frac{dC}{dT} = K \frac{d^2C}{dx^2} \quad (10)$$

где C – концентрация ЗВ, T – время; x – расстояние от источника, K – коэффициент вихревой или турбулентной диффузии.

Наиболее часто в одномерном виде уравнение выглядит следующим образом:

$$\frac{dC}{dT} = -\frac{d}{dx}(UC) + \frac{d}{dx}\left(K \frac{dC}{dx}\right) + F \quad (11)$$

где: C – концентрация ЗВ, T – время, x – расстояние от источника, U – средняя скорость ветра в направлении оси x , K – коэффициент вихревой или турбулентной диффузии F – функция, описывающая параметры источника выброса [8]

8) Модель, основанная на уравнении Навье-Стокса для вязкого газа, содержит уравнения диффузии газов и аэрозолей, уравнения для влажности и потенциальной температуры. Для описания реальных течений приемлемую точность численного решения с применением данной модели можно получить только при такой расчетной сетке, ячейки которой меньше самого мелкого вихря. Это требует очень больших затрат расчетного времени на современных компьютерах. [8].

9) Транспортно-диффузионные методы. Впервые в нашей стране транспортные модели стали разрабатываться в 60-е годы XX века в Главной Геофизической Обсерватории (ГГО) под руководством доктора Берлянда. Результаты опубликованы в журналах «Труды ГГО» и «Метеорология и гидрология», некоторые статьи приведены в [4]. Основу этой модели составляет уравнение турбулентной диффузии:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial q}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} K_i \frac{\partial q}{\partial x_i} - \alpha q \quad (12)$$

где q – рассчитываемая примесь, x_i – координаты, u_i , K_i – составляющие средней скорости перемещения примеси и коэффициента обмена, относящиеся к направлению оси x_i ($i = 1, 2, 3$), α – коэффициент, определяющий изменение концентрации за счёт превращения примеси.

Универсальные модели с использованием искусственного интеллекта

В настоящее время для расчета рассеивания атмосферных примесей наиболее активно используются два типа нейросетей:

- Многослойная нейронная сеть из входящего, одного или нескольких внутренних и выходящего слоев (многослойный персептрон), для моделирования процесса парникового эффекта и др.

- Сеть состоит только из входящего и выходящего слоев. Выходящий слой обычно состоит из элементов, объединенных в двумерную квадратную (или другой геометрической формы) решетку (самоорганизующаяся карта). Модели используются в приложениях, каким-либо образом касающихся кластеризации данных [9,10].

Нейронные сети имеют значительные перспективы развития для моделирования распространения вредных веществ. В первую очередь их преимущество сказывается за счет возможности использования неточных и неполных данных в качестве исходных величин для решения таких задач.

Примеры практического применения нейросетевых моделей для задач распространения примесей:

1. Моделирование загрязнений атмосферы промышленными выбросами. Точность прогноза составляет порядка 95%.

2. Модели предсказания неблагоприятных экологических ситуаций [12]. Точность предсказания – порядка 80%.

Гибридные структуры. Большие перспективы сулит создание и использование моделей, сочетающих в себе свойства сразу нескольких инновационных подходов к моделированию экосистем. Ярким примером такой гибридной системы могут служить нечеткие нейронные сети. Нечеткие нейронные сети (fuzzy-neural networks) осуществляют выводы на основе аппарата нечеткой логики, однако параметры функций принадлежности настраиваются с использованием алгоритмов обучения нейросетей.

Примеры практического применения нейронечетких моделей:

1) Нечеткий расчет экологического вероятностного риска [12].

2) Системы поддержки принятия решений по организации мероприятий, способствующих повышению экологической безопасности [13].

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. Белов И.В., Беспалов М.С., Клочкова Л.В., Павлова Н.К., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф. Москва, Математическое моделирование, 7, 11 (1999).
4. Белов И.В., Беспалов М.С., Клочкова Л.В., Кулешов А.А., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф. Москва, Математическое моделирование, 12, 11 (2000).
5. Armistead G. Russell Camagie mellon university.. 692 (1988).
6. Маркванд В., Иле П. Метеорологические аспекты загрязнения атмосферы. Гидрометеиздат: Ленинград, 239. (1988).
7. Хессе Х, Кирхнер Б., Виндиш Х. Метеорологические аспекты загрязнения атмосферы. Гидрометеиздат, Ленинград, 239 (1988).
8. Темам Р. Уравнения Навье — Стокса. Теория и численный анализ. 2-е изд. Москва, Мир, 1981, 408с.
9. С. Осовский Нейронные сети для обработки информации. Финансы и статистика, Москва, 2002, 344с.
10. Р. Калан Основные концепции нейронных сетей. «Вильямс», Москва, 2001, 287с.
11. Тунакова Ю.А., Новикова С.В. Использование нейросетевых технологий для целей прогноза высокого уровня загрязнения атмосферного воздуха в городах. // Безопасность жизнедеятельности. - Москва, Новые технологии, 1, 21-28 (2011).
12. Новикова С.В. Народное хозяйство. Всероссийский научно-практический журнал. Изд-во МИИ Наука, Москва, 2. 245-253 (2011).
13. Новикова С.В. Нелинейный мир. Радиотехника, Москва, 12, 818-821 (2011).

© Ю. А. Тунакова – д-р хим. наук, проф., зав. каф. общей химии и экологии КНИТУ им. А.Н. Туполева-КАИ, julia-prof@mail.ru; Р. А. Шагидуллина – канд. хим. наук, нач. отдела нормирования воздействия на окружающую среду Министерства экологии и природных ресурсов РТ, julia-prof@mail.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, kstu-material@mail.ru; Э. В. Гоголь – канд. хим. наук, доц. каф. общей химии и экологии КНИТУ им. А.Н. Туполева-КАИ; А. Т. Галиева – асп. той же кафедры.