

УДК 519.876.6

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ ИСТОЧНИКОВ ПОВЫШЕННОГО АТМОСФЕРНОГО ВЫБРОСА

Шнайдер И.А. (Саратов)

Введение

Проблема экологического благополучия окружающей среды становится в последние годы все более актуальной по целому ряду причин. Среди них – изменение климата и угроза биоразнообразию, ухудшение качества жизни и здоровья людей, устойчивость социального и экономического развития стран и многие другие. Важную роль в охране окружающей среды играет экологический мониторинг. Он позволяет своевременно обнаруживать опасные источники загрязнений, оценивать текущее состояние окружающей среды и эффективность мер по ее защите, повышать осведомленность и экологическую грамотность населения.

Одной из актуальных задач учреждений экологического контроля является мониторинг выбросов от инвентаризованных источников и поиск незарегистрированных источников загрязнения. Результаты этого поиска могут быть использованы для повышения экологического благополучия территории и качества жизни населения. Кроме того, промышленные предприятия, не превышающие заявленную норму выбросов, могут избежать штрафов за нарушение экологических нормативов. Продолжающийся процесс индустриализации и технический прогресс способствуют появлению все большего числа промышленных предприятий, зачастую соседствующих друг с другом. Это усложняет осуществление экологического мониторинга на промышленной территории и затрудняет процесс поиска новых источников загрязнения.

При решении задач локализации источников загрязнений применяется комплекс математических методов и моделей для расчета распространения загрязнителей. Направление по моделированию распространения загрязнений атмосферного воздуха берет свое начало с 30-х годов прошлого столетия и остается актуальным по сей день. Наиболее распространенным и применяемым решением стала математическая модель Гауссова шлейфа с ее модификациями для более строгих начальных условий [1] и комбинациями с другими методами моделирования распространения загрязнений.

Один из последних результатов описан в статье [2], где модель Гауссова шлейфа улучшена путем комбинации с моделью PUFF-UAF. Последняя разработана для анализа распространения вулканического пепла и основана на Лагранжевой модели. Этот подход позволил повысить точность прогнозирования концентраций, а также определить участки вокруг кратеров вулкана, которые могут являться потенциальными источниками более сильных выбросов пепла. Идея поиска неизвестных источников путем решения обратной задачи подробно описана в [3]. Для решения обратной задачи применяется компьютерная реализация модели, использующая данные мониторинга в сочетании с методом Монте-Карло. Впоследствии был разработан более удобный алгоритм оценки интенсивности выбросов неизвестного источника на основе наблюдений и применения улучшенной версии модели Гауссова шлейфа с учетом оседания – решение Д. Эрмака [4].

В статье [5] был предложен метод комбинации многомерного и линейного поиска для ускорения алгоритма метода роя частиц (далее – МРЧ). Данный подход был назван «гибридным методом роя частиц» (далее – ГМРЧ). Алгоритм не требует нахождения производной функции стоимости [6]. Разница между суммой квадратов отклонений между измеренной и ожидаемой концентрацией, рассчитанной по модели

Гауссова шлейфа, используется как функция приспособленности. Для эффективного определения местоположения источника загрязнения и подсчета уровней выбросов определяется оптимальное расположение датчиков. В рамках данного исследования проведено сравнение результатов, полученных с помощью алгоритмов МРЧ, ГМРЧ, и генетического алгоритма при поиске местоположения одного источника загрязнения. Исследование подтверждает, что ГМРЧ имеет значительно более высокую производительность при определении местоположения источника загрязнения, чем базовый алгоритм МРЧ.

В отечественных работах [7, 8] говорится о поиске новых источников загрязнения атмосферного воздуха на основе результатов непрерывных наблюдений за его качеством. Сделан акцент на организационные аспекты внедрения в системы экологического мониторинга, а не на имитационное моделирование и средства для него, которые могли бы сделать работу экспертов более продуктивной.

Таким образом, для развития и совершенствования отечественных конкурентоспособных систем экологического мониторинга актуальной является задача разработки специализированного математического и программного обеспечения для локализации новых источников выбросов. В настоящем докладе предлагается постановка задачи и подход к ее решению, сочетающий в себе ключевые преимущества полученных на сегодня результатов и развитие модели Гауссова шлейфа.

1. Постановка задачи локализации источников повышенного атмосферного выброса

Общая задача локализации источников повышенного атмосферного выброса может быть формально представлена следующим образом. Пусть территория S подвергается загрязнению поллютантом P вследствие функционирования на территории S' множества источников загрязнения Ω . Множество Ω включает подмножество Ω' источников загрязнения с известными координатами и задекларированными интенсивностями выброса. Также на территории S расположена система датчиков $\Sigma(t)$ в известных контрольных точках. Требуется по наблюдениям метеоданных $X(t)$ и концентрации поллютанта $Y(t)$ на датчиках $\Sigma(t)$ в течение интервала времени $[t_0, t_1]$ определить:

- координаты источников из Ω' , которые на достаточно длительных интервалах из $[t_0, t_1]$ превышали задекларированную интенсивность выбросов поллютанта P , а также интенсивность и длительность выбросов;
- координаты источников из $\Omega \setminus \Omega'$ (то есть новых, незарегистрированных источников), которые на достаточно длительных интервалах из $[t_0, t_1]$ осуществляли выбросы поллютанта P , а также интенсивность и длительность этих выбросов.

В общем случае можно утверждать, что данная задача поставлена некорректно. Поэтому варианты ее решения могут быть частью итерационного процесса, сопровождающегося решением вспомогательных задач. Среди таких вспомогательных задач рассмотрим следующий частный случай. Предположим, что выбросы источников из множества Ω' не превышают задекларированных значений, при которых суммарное загрязнение от источников из этого множества не превышает некоторого известного значения, наблюдаемого ранее (или предельно допустимой концентрации (ПДК) поллютанта P). При этом на некоторых датчиках системы $\Sigma(t)$ наблюдается достаточно большое превышение данного значения. Требуется найти источник из $\Omega \setminus \Omega'$, выбросы которого повлекли это превышение. При этом при достаточно частом повторении циклов мониторинга и сравнительно небольших территориях можем предполагать, что источник единичный. Содержательно такая задача состоит в определении участков исследуемой территории, на которых может находиться незарегистрированный источник загрязнения.

В определенном смысле, данную задачу можно рассматривать как обратную к задаче расчета рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере. Для решения предлагается применение комбинированного подхода, сочетающего в себе преимущества различных методов решения обратной задачи. Результатом исследования будет программный комплекс, реализующий описанный в статье подход и позволяющий локализовать источник загрязнения на основе данных экологического мониторинга и метеорологических наблюдений за длительный период времени.

2. Используемые математические модели

Наиболее распространенной моделью рассеивания загрязнителя в атмосфере является модель Гауссова шлейфа. Распространение загрязнителя в атмосфере может быть описано дифференциальным уравнением в частных производных, известным как уравнение переноса. Предположим, что: скорость ветра постоянна, неизменна и параллельна оси x ; загрязнитель выбрасывается источником с постоянной интенсивностью Q ; турбулентная диффузия изотропна и зависит только от расстояния от источника по оси x ($K_x = K_y = K_z = K(x)$).

Пусть также модель стационарна, рельеф местности преимущественно плоский, а диффузия загрязнителя в направлении ветра пренебрежимо мала в сравнении с его скоростью. Исходя из данных предположений, получаем упрощенное выражение (1) для уравнения переноса [3]:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (1)$$

при расположении источника в точке $(0, 0, H)$.

Решением этого уравнения является выражение (3) для нахождения концентрации поллютанта в точке пространства:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right], \quad (2)$$

где $\sigma_i^2 = \frac{2K}{u}$ – дисперсии нормального распределения; x, y, z – координаты точки расчета (м); H – высота источника загрязнения (м); Q – интенсивность выбросов (кг/с).

Коэффициенты Гауссовского распределения σ_i зависят от класса стабильности атмосферы и определяются как функция расстояния x . Чем выше класс стабильности атмосферы, тем большее расстояние сможет преодолеть загрязнитель, прежде чем рассеется.

Соответственно, для случая нескольких источников выброса выражение для концентрации в точке примет вид

$$C_t(x, y, z) = \sum_{j=1}^n C(x'_j, y'_j, z'_j, Q_j, H_j), \quad (3)$$

где x'_j, y'_j, z'_j – координаты точки относительно источника j , Q_j, H_j – интенсивность выбросов и высота источника j .

3. Подход к решению задачи

Для решения задачи локализации неизвестного источника выбросов предлагается выполнить следующие шаги:

- первоначальный анализ данных экологического мониторинга и метеорологических наблюдений с целью выявления временных отрезков, на которых фиксируется превышение ПДК поллютанта;
- проведение симуляций с использованием модели Гауссова шлейфа для расчёта распространения загрязнителей, выброшенных зарегистрированными источниками на данных временных отрезках;

- определение интенсивности выбросов возможного незарегистрированного источника загрязнений с помощью алгоритма на основе модели Д. Эрмака и метода наименьших квадратов [6];
- имитационное моделирование выбросов незарегистрированного источника с различных участков исследуемой территории с использованием алгоритма ГМРЧ;
- сравнение результатов и формирование предположений о нахождении незарегистрированного источника выбросов.

4. Разработанное обеспечение

В проведенном исследовании использовались данные измерений экологической обстановки и погодных условий за три последних 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, \dots, R_5 , отмеченные на картосхеме (рисунок 1) зелеными маркерами, осуществляющие наблюдение за качеством воздуха путем измерения концентраций загрязняющих веществ и метеорологических данных (скорость и направление ветра, температура и влажность воздуха, атмосферное давление). Также на участке расположены инвентаризированные 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 в атмосферу загрязняющих веществ.

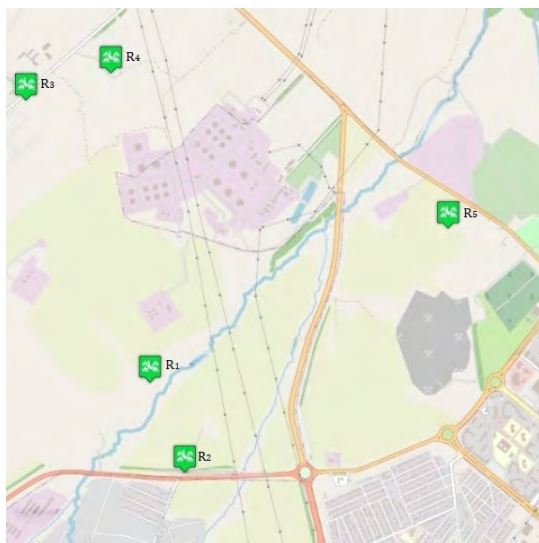


Рис. 1. Картосхема исследуемой области

Для реализации первых двух шагов предложенного подхода была разработана, откалибрована и испытана реализация модели Гауссова шлейфа на высокоуровневом языке программирования Python. Программа позволяет моделировать распространение загрязнителя атмосферы, выброшенного зарегистрированными источниками на исследуемой области, и получать значения концентраций загрязнителя по заданным точкам.

Программа состоит из нескольких 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-сервис «Яндекс.Погода».

- 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. После расчета дисперсий значения подставляются в формулу и рассчитываются для каждой точки координатной сетки.

- Модуль отрисовки для отображения результатов симуляции на схеме исследуемого участка промышленной территории и тепловой карте.

В отличие от других известных имплементаций модели Гауссова шлейфа, в данной программе сделан ряд качественных улучшений. Так, значение влажности воздуха и класс стабильности атмосферы не предполагается неизменным в течение одной симуляции. Для повышения точности расчета класс стабильности определяется на каждой итерации на основе информации об облачности на данном участке местности в заданный период времени, получаемой от API онлайн-сервиса «Яндекс.Погода», а также доступной в базе информации об атмосферном давлении. Также в дальнейшем исследовании предполагается доработка программы для учета влияния на распространение загрязнителя атмосферных осадков.

Модель была откалибрована с использованием реальных данных наблюдений за экологической обстановкой на исследуемом участке.

5. Полученные результаты моделирования

Приведем некоторые результаты моделирования для демонстрации первых двух шагов предложенного метода решения задачи. Первоначальный анализ информации в базе наблюдений показывает повышенную концентрацию сероводорода в атмосфере в течение нескольких часов 23 и 24 ноября 2022 года по датчикам R_1 и R_2 . Проведем симуляцию с использованием данных наблюдений и информации о зарегистрированных источниках. Время симуляции – 24 часа, длина временного отрезка итерации – 20 минут. Число итераций составило 72, время проведения симуляции – 13 секунд. Результаты моделирования представлены в виде картосхемы с нанесенным распределением загрязнителя на рисунке 2.

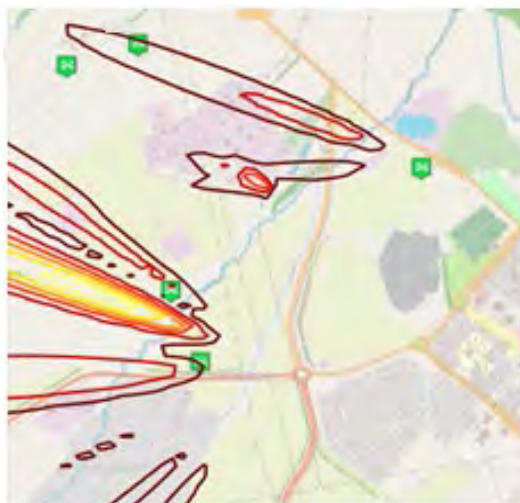


Рис. 2. Распространение сероводорода 23-24 ноября 2022, класс стабильности атмосферы E

Средняя абсолютная ошибка модели составила $MAE = 0,000029087$, среднеквадратичная ошибка – $MRSE = 0,000108$, средняя процентная ошибка – $MAPE = 49,55\%$. На сравнительной диаграмме результатов моделирования (рисунок 3) заметны значительные отклонения на промежутках 24.11.2022 8:00:00 – 8:20:00, 24.11.2022 3:40:00 – 4:00:00, 23.11.2022 14:00:00 – 14:20:00, что объясняется низкой скоростью ветра (менее 1 м/с) на данных временных промежутках.

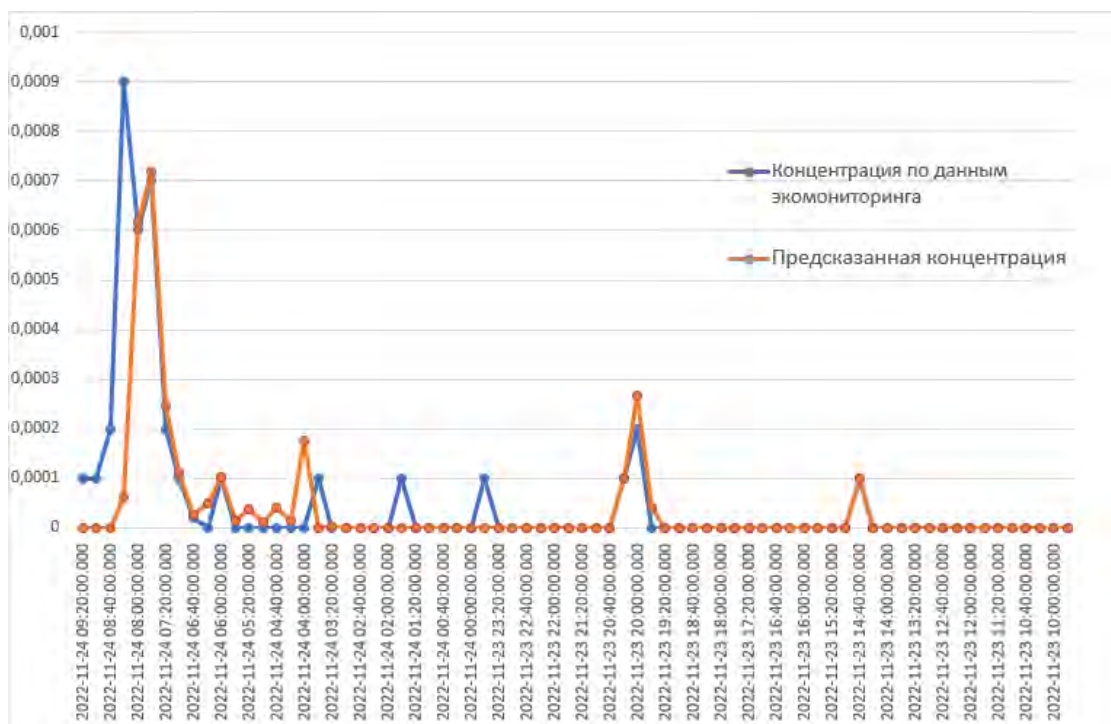


Рис. 3. Сравнительная диаграмма измеренных и полученных путем моделирования значений концентрации

6. Обсуждение

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

- относительная простота и эффективность вычислений;
- учет влияния стабильности атмосферы и направления ветра на рассеивание загрязняющих веществ;
- возможность использования для оценки приземных концентраций загрязняющих веществ на относительно больших территориях;
- возможность адаптировать модель для различных загрязнителей и типов источников.

Недостатки модели:

- ограниченная применимость для случаев с низкой (менее 1 м/с) скоростью ветра;
- в модели не учитывается возможный сложный ландшафт местности или сооружения, которые могут влиять на рассеивание загрязняющих веществ, соответственно низкая применимость для случаев с неровным и неравномерным рельефом местности;
- также не учитываются возможные химические реакции в облаке шлейфа и оседание загрязнителя;
- неточное прогнозирование концентрации загрязнителей в областях, близких к источнику выброса.

В дальнейшем с целью распространения предложенного подхода на более широкий класс случаев будут исследованы реализации моделей распространения загрязнителей в атмосфере с более слабыми начальными предположениями.

Заключение

В статье предлагается формальная постановка задачи локализации источников повышенного выброса поллютантов и подход к ее решению. Разработана и апробирована компьютерная реализация развитой модели Гауссова шлейфа. Разработанное обеспечение позволяет проводить моделирование распространения загрязнителя атмосферы на основе реальных данных измерений экологической обстановки и погодных условий по заданному участку местности для каждой итерации симуляции в автоматизированном режиме. Выявлены преимущества и недостатки данного метода моделирования. Определены цели дальнейшего исследования для получения эффективных средств контроля экологической обстановки на промышленной территории.

Литература

1. **John M. Stockie.** The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modeling // SIAM Review. – 2011. – Vol. 53. – No. 2. – P. 349–372.
2. **Jooyong Lee, Sungsu Lee, HyunA. 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.
3. **Animesh Khemka, Charles A. Bouman, Mark R. Bell** Inverse problems in atmospheric dispersion with randomly scattered sensors // Digital Signal Processing. – 2006. – Vol. 16. – Iss. 5. – P. 638–651.
4. **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.
5. **Wipawinee Chaiwino et al.** Identifying the Locations of Atmospheric Pollution Point Source by Using a Hybrid Particle Swarm Optimization // Symmetry. – 2021. – Vol. 13. – No. 985.
6. **Kenned, J., Eberhart R.** Particle Swarm Optimization // Proc. of the ICNN'95 – International Conference on Neural Networks. – Perth, 1995. – P. 1942–1948.
7. **Lapkovsky R.Y. et al.** Organization of Measurement Data Collection and Primary Processing Regional Environmental Monitoring Systems // Lecture Notes in Networks and Systems. – 2021. – Vol. 230. – P. 142–151.
8. **Lapkovsky R.Y. et al.** An approach to finding sources of pollution to maintain stable air quality // IFAC-PapersOnLine. – 2022. – Vol. 20. – P. 631–635.