

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Тольяттинский государственный университет»

Институт химии и энергетики

(наименование института полностью)

Кафедра

«Химическая технология и ресурсосбережение»

(наименование)

18.04.01 Химическая технология

(код и наименование направления подготовки)

Рациональное использование природных и сырьевых ресурсов в химической технологии и
нефтехимии

(направленность (профиль))

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА (МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ)

на тему Комплексная и модельная оценка загрязнения атмосферного воздуха на
селитебных территориях

Обучающийся

А.В. Щеголев

(Инициалы Фамилия)

(личная подпись)

Научный

руководитель

канд. пед. наук, доцент М.В. Кравцова

(ученая степень (при наличии), ученое звание (при наличии), Инициалы Фамилия)

Тольятти 2023

Содержание

1. Литературный обзор	7
1.1. Методы расчета рассеивания загрязняющих веществ и математические модели для прогнозирования рассеивания загрязняющих веществ	7
1.2. Расчетные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере.....	29
2. Экспериментальная часть	44
2.1. Анализ состояния атмосферного воздуха на территории г.о. Тольятти.....	44
2.2. Разработка прогностической модели для оценки качества атмосферного воздуха.....	51
Заключение	78
Список используемой литературы	80

Введение

Актуальность и научная значимость настоящего исследования.

На данный момент остро стоит проблема контроля качества атмосферного воздуха.

Химические вещества, в том числе токсичные вещества, имеют различные пути выброса в атмосферу. Они могут выбрасываться либо из приблизительно точечных источников (например, аварийный выброс на атомных электростанциях (АЭС) или извержения вулканов), либо из площадных источников (например, выброс прекурсоров фотохимического смога и лесные пожары). Загрязняющие вещества воздуха могут распространяться на сотни и даже тысячи километров от места их выброса по всему миру в зависимости от их химических и физических свойств (например, химического состава, растворимости в воде или гранулометрического состава частиц), и они влияют на здоровье человека и приводят к долгосрочному воздействию на нашу окружающую среду [16], [20], [28].

Для сохранения человеческих жизней и снижения экономических потерь разрабатываются вычислительные модели рассеивания загрязняющих веществ воздуха, позволяющие понять и предсказать последствия этих явлений и аварий. Моделирование модели должно быть быстрым и иметь высокую степень точности для использования в режиме реального времени. Таким образом, одной из основных задач моделирования атмосферной дисперсии является разработка моделей и программного обеспечения, которые могут обеспечивать численные прогнозы точным и эффективным с вычислительной точки зрения способом.

Другие процессы, такие как турбулентность, химические реакции, радиоактивный распад и осаждение, также могут играть важную роль в рассеивании токсичных веществ. Еще одним важным вопросом при моделировании рассеивания загрязняющих веществ воздуха является анализ продолжительности стабильного состояния химических веществ и

характерного расстояния, на которое они могут переноситься, что коррелирует со временем стабильности. Если выбрасываемые частицы имеют короткое время стабильности то, они не могут переноситься на большие расстояния, и их воздействие будет сосредоточено в локальном масштабе. Однако химические вещества, такие как NO_x , SO_2 , имеющие более длительный срок стабильности в атмосфере, могут иметь более широкие зоны воздействия. Следовательно, в таких случаях необходимы региональные или континентальные подходы к моделированию [11], [12].

Для моделирования рассеивания загрязняющих веществ воздуха были разработаны различные подходы к моделированию. Моделирование рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере является одной из важнейших и сложных научных задач. Моделирование рассеивания загрязнителей воздуха может предсказать эффект от каждого источника выброса, поэтому разработка различных модельных стратегий является важным элементом для современных действий по охране окружающей среды.

Статья «Моделирование загрязненности атмосферного воздуха на селитебных территориях» была опубликована в сборнике студенческих работ «Молодежь. Наука. Общество» 2020г. Всероссийская студенческая научно-практическая междисциплинарная конференция: Тольятти, 25 декабря 2020 - 29 января 2021 года

Объект исследования: выбросы загрязняющих веществ от промышленных источников г.о. Тольятти.

Предмет исследования: моделирование рассеивания загрязняющих веществ от промышленных источников г.о. Тольятти.

Цель: обеспечение качества атмосферного воздуха при использовании прогностической модели загрязнения атмосферного воздуха.

Гипотеза исследования состоит в том, что при использовании математической модели рассеивания загрязняющих веществ возможно предположить местонахождение источника выброса.

Для успешной реализации цели были сформулированы следующие задачи:

- провести литературный обзор в области прогностических моделей для оценки качества атмосферного воздуха;
- анализ состояния атмосферного воздуха на территории г.о. Тольятти;
- разработка прогностической модели для оценки качества атмосферного воздуха.

Теоретико-методологическую основу исследования составили научные работы следующих научных школ – Главной геофизической обсерватории имени А.И. Войекова, Института экспериментальной метеорологии, Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, а также работы Ю.И. Дытнерского.

Методы исследования: в исследовании применили практические и теоретические методы, с помощью которых систематизирована информация по теме исследования, определена модель для разработки обратной задачи, проведено математическое преобразование математической модели.

Опытно-экспериментальная база исследования проводилась на базе Тольяттинского государственного университета.

Научная новизна исследования заключается в: предложении использования математической модели рассеивания загрязняющих веществ для предположения местонахождения источника выброса загрязняющих веществ.

Теоретическая значимость исследования заключается в анализе и систематизации информации по методам расчета и существующим математическим моделям рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере.

Практическая значимость исследования заключается в математическом преобразовании математической модели рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере с целью определения приблизительного местонахождения источника выброса.

Достоверность и обоснованность результатов исследования обеспечивались: изучением литературных источников по теме исследования российских и зарубежных авторов, получением результатов, не противоречащих информации, полученной из научных источников.

Личное участие автора в организации и проведении исследования состоит в проведении поиска и анализа литературных источников по теме исследования, систематизации данных по методам расчета рассеивания и существующим моделям, проведении анализа перечня загрязняющих веществ г.о. Тольятти, математических операциях над математической моделью рассеивания.

Апробация и внедрение результатов работы велись в течение всего исследования. Публикация по теме исследования:

На защиту выносятся: математическая модель расчета расположения источника выброса загрязняющих веществ

Структура магистерской диссертации. Работа состоит из введения, 2 разделов, заключения, содержит 10 рисунков, 8 таблиц, список использованной литературы (31 источника). Основной текст работы изложен на 82 страницах.

1. Литературный обзор

1.1. Методы расчета рассеивания загрязняющих веществ и математические модели для прогнозирования рассеивания загрязняющих веществ

Основной задачей моделирования загрязнения атмосферного воздуха является оценка концентрации загрязнителей в воздухе от промышленных объектов, выбросов от стационарных источников, а также фоновых концентраций от других объектов. Моделирование позволяет определить дальность переноса загрязнителей, также позволяет определить степень воздействия на окружающую среду источников и какой источник вносит вклад. Исходя из веществ характерных для данной местности, наибольший интерес для моделирования заключается в среднегодовых концентрациях или в пиковых концентрациях.

Для моделирования рассеивания применяют разные методики расчета. Основными факторами, которые влияют на рассеивание загрязняющих веществ, являются три основные группы:

- характеристика источника загрязнения (количество источников выбросов, мощность, тип, удаленность и т.д.),
- характеристика территории (этажность построек, площадь озеленения, расположение улиц),
- метеорологические параметры (скорость и направление ветра, температура, влажность воздуха, осадки).

В настоящее время существуют десятки методик расчета рассеивания загрязняющих веществ: одни из них ориентированы на расчет конкретного загрязняющего вещества, другие подходят для комплексного расчета. На основе данных методик созданы модели, прогнозирующие рассеивание загрязняющих веществ в атмосфере. Процесс рассеивания загрязняющих веществ является одним из самых важных вопросов современного мира. От

загрязнения атмосферного воздуха зависит экономическое и социальное состояние данного региона, поэтому последние десятилетия возникает необходимость в повышении точности прогнозирования рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере.

Для каждого типа предприятия, которые осуществляют выброс загрязняющих веществ в атмосферу, предусмотрена норма выбросов. Для соответствия заданной норме содержания загрязняющих веществ в приземном слое атмосферы требуется создание математической модели прогнозирования распространения выбросов загрязняющих веществ. Такая модель должна учитывать все необходимые метеорологические и географические данные для более адекватного отображения картины рассеивания загрязняющих веществ.

В настоящее время разработано несколько моделей с различными ограничениями, так как одни и те же функции для одного и того же типа источника могут отличаться в зависимости от типа устойчивости атмосферы и скорости ветра.

Приоритетно в настоящее время используются две методики, рекомендованные для расчета распределения загрязняющих веществ. Первая – это является Приказ от 06 июня 2017 года «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе». И вторая – Гауссова модель, разработанная Пасквиллом [3].

Отдельно выделяют модели для нестационарных источников загрязнения. Для учета неоднородности поверхности при расчете нестационарной модели выброса используют полуэмпирические уравнения МАГАТЭ. Данные модели позволяют произвести расчет траектории и времени движения облака загрязняющих веществ в нужных метеорологических условиях или до падения концентрации.

В целом модели расчета можно разделить на четыре основные группы:

- модели на основе распределения Гаусса,
- имитационные модели,
- модели с уравнениями в частных производных,

- статистические модели.

1.1.1. Уравнения на основе распределения Гаусса

Модели, в основе которых лежит нормальное распределение (распределение Гаусса) загрязняющих веществ в атмосфере основываются на уравнении турбулентной диффузии с некоторыми допущениями. Для расчетов принимается стационарные источники выбросов, воздушный поток движется с одинаковой скоростью, диффузия в других направлениях меньше, чем средняя скорость переноса вещества [1], [5], [6], [13].

В данной теории приняты несколько допущений:

- рассеяние в горизонтальной и вертикальной плоскостях описывается нормальным распределением со стандартными отклонениями распределения концентраций σ_y и σ_z по осям y и z ;
- действующая на струю средняя скорость ветра u является постоянной во всем слое и направление ветра не меняется;
- мощность выброса постоянна;
- имеет место отражение струи от поверхности земли, т.е. нет осаждения или взаимодействия струи с подстилающей поверхностью.

Основное уравнение рассеивания в гауссовой теории (уравнение 1):

$$C(x, y, z, H) = \frac{Q}{2\pi\delta_y\delta_z u} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\delta_y}\right)^2\right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\delta_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\delta_z}\right)^2\right] \right\} \quad (1)$$

где C – концентрация загрязняющих веществ в точке выброса с координатами (x, y, z) при выбросе мощностью Q на высоте H , представленная гауссовым распределением,

δ_y, δ_z – функции рассеивания от источника,

u – средняя скорость ветра, которая действует на поток выброса.

Пример распределения представлен на рисунке 1. Струя выброса распространяется по оси X, при этом профили концентраций подчиняются распределению Гаусса [2].

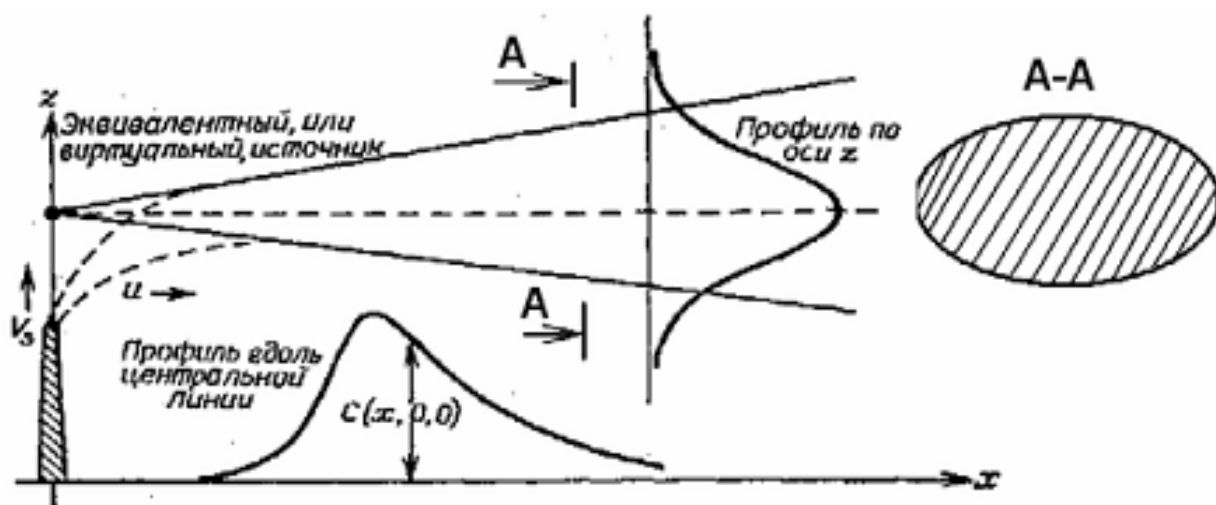


Рисунок 1 – Профили концентраций вдоль осей X и Z.

На основе нормального распределения разработаны множество моделей, такие как например, CAL3QHC, CALINE4, CAR-FMI и другие. Большинство разработанных моделей описывают рассеивание загрязняющих веществ от линейного источника выброса, который можно разделить на точечные и далее просуммировать все полученные результаты концентраций.

В работе американского автора S.G. Perry и его коллег применяется модель на основе распределения Гаусса. Авторы статьи провели работу по исследованию влияния местоположения источника выброса загрязняющих веществ, соотношение сторон зданий и направление ветра на рассеивание загрязняющих веществ из дымовых труб. Авторы отметили разницу в шлейфе, который уносится с подветренной стороны здания для различных местоположений и высот источника выброса. Профили распределения концентраций были параметризованы с помощью уравнения Гаусса. Полученное уравнение показывает влияние параметров здания и источников выбросов на профиль концентраций. При расположении здания под углом в 45° относительно потока воздуха эффективная высота снижается быстрее, чем для

здания, которое расположено перпендикулярно. Влияние данного фактора мало представлены в моделях рассеивания загрязняющих веществ, являясь важными факторами при расчете рассеивания выбросов с учетом особенностей местоположения [9].

Наилучшее соответствие по боковым профилям было достигнуто при использовании следующего уравнения Гаусса (уравнение 2):

$$C = \frac{B}{\sigma_y} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y - \Delta_y)^2}{\sigma_y^2}\right) \quad (2)$$

где параметры B, σ_y, Δ_y могут варьироваться для нахождения наилучшего соответствия.

Параметры σ_y, Δ_y характеризуют боковое смещение шлейфа и боковую дисперсию. Параметром B представлены сила источника, скорость ветра и вертикальная дисперсия.

Для проведения расчетов авторы воспользовались моделью AERMOD. Данная модель основана на нормальном распределении и представляет собой интегрированную систему из трех модулей [14].

Первый модель состоит из стационарной модели рассеивания, которая рассчитана для: рассеивания до 50 км, прямых выбросов в атмосферу и стационарных источников выбросов.

Второй модуль представляет собой препроцессор, то есть компьютерную программу, которая преобразовывает входные данные в выходные для дальнейшего использования в другой программе. Данный модуль обрабатывает метеорологические данные, данные аэрологического зондирования и данные с приборов на вышках. На выходе получают параметры атмосферы, которые необходимы для расчетов рассеивания: характеристика атмосферной турбулентности, высота перемешивания, скорость трения, длина Монина-Обухова, поверхностный тепловой поток.

Третий модуль также является препроцессором, но его задачей является поиск взаимосвязи между данным рельефом и поведением шлейфа загрязненного воздуха. Данная модель выдает данные для каждого заданного местоположения.

Кроме данной работы автор Guang Ze Guo и его коллеги рассмотрели данную проблему. В этом исследовании применялась вычислительная гидродинамика для моделирования рассеивания загрязняющих веществ, выбрасываемых из вентиляционных труб на крыше вокруг высотных зданий. Вычислительная гидродинамика – это подраздел механики сплошных сред, представляющий собой совокупность физических, математических и численных методов расчета потоковых процессов. Результаты показывают, что в процессе рассеивания преобладают взаимодействие ветра с конструкцией, угол падения ветра, расположение источника выброса и высота вентиляционной трубы, а дисперсия более сложна вокруг зданий в форме креста, чем кубических. Когда угол падения ветра достигает примерно 90° , загрязняющие вещества уносятся при повторном входе в здание, тем самым препятствуя процессу рассеивания. Авторы пришли к выводу, что изменение места выброса загрязняющих веществ в атмосферу и увеличение высоты вентиляционной трубы может значительно уменьшить площадь поражения [4].

Методика Пасквилла основывается на Гауссовой модели рассеивания. При попадании загрязняющих веществ в атмосферу образуется облако, которое сносится вместе с окружающим атмосферным воздухом в направлении ветра. В процессе движения осуществляется турбулентное перемешивание облака с окружающим атмосферным воздухом. При этом расчет должен учитывать расширение облака и изменение концентрации загрязняющих веществ. Распределение концентрации в данном процессе описывается нормальным распределением. Расчет приземной концентрации загрязняющего вещества от его диффузии от непрерывного источника с учетом неизменных метеорологических условий имеет вид (уравнение 3):

$$C(x) = \frac{Q}{\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp\left[-\left(\frac{H_{\text{эфф}}^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] f_F f_W \quad (3)$$

где $C(x)$ – концентрация, Бк/м³;

Q – мощность источника, Бк/с;

$H_{\text{эфф}}$ – эффективная высота выброса, м;

u – скорость ветра на эффективной высоте выброса, м/с;

σ_y, σ_z – коэффициенты дисперсии распределения Гаусса (турбулентной диффузии) в направлениях перпендикулярных к направлению ветра, м;

f_F – эмпирический фактор обеднения, который учитывает сухое осаждение;

f_W – эмпирический фактор обеднения, учитывающий вымывание осадками.

Коэффициенты турбулентной диффузии рассчитывают по эмпирическим формулам, которые на данный момент признаны достаточно надежными. Данные коэффициенты учитывают устойчивость атмосферы и тип поверхности. Гауссова модель обладает такими достоинствами, как:

- учет устойчивости атмосферы,
- учет типа поверхности,
- учет теплового подъема выбросов из-за перегрева смеси,
- учет выпадения примесей на поверхность земли,
- учет вымывания осадками.

Однако данная модель не может применяться для расчета рассеивания загрязняющих веществ на расстоянии более 10 км от источника и при скорости ветра менее 1 м/с.

Гауссова модель лежит в основе методик расчета рассеивания примесей МАГАТЭ, включающие рекомендации для расчета дисперсий по исходным состояниям атмосферы. Модели МАГАТЭ могут быть использованы для

стационарных источников выбросов. На данный момент представленные модели являются наиболее полными эмпирическими моделями из существующих. Они учитывают особенности местных метеорологических условий и производить расчеты в текущих условиях. Однако модели требуют работы над ними для точных расчетов в конкретной местности [8].

В стандартной модели, основанной на распределении Гаусса, есть три основных недостатка:

- не учитывается рельеф местности,
- метеорологические условия должны оставаться постоянными,
- источник выбросов – стационарный.

1.1.2. Уравнение турбулентной диффузии

В основе имитационных моделей лежит уравнение турбулентной диффузии (уравнение 4):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} u \cdot C + \frac{\partial}{\partial y} v \cdot C + \frac{\partial}{\partial z} w \cdot C = \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial C}{\partial z}$$

где C – концентрация загрязняющего вещества, г/м³;

D_x, D_y, D_z – коэффициенты турбулентной диффузии, м²/с;

u – средняя скорость ветра по оси Ox , м/с;

v – средняя скорость ветра по оси Oy , м/с;

w – средняя скорость ветра по оси Oz , м/с

При $\beta=0$ поток на поверхности равен нулю и загрязняющие вещества отражаются от поверхности земли, при $\beta=\infty$ загрязняющие вещества полностью остаются на поверхности земли, а при условии $0 < \beta < \infty$ – загрязняющие вещества частично остаются на поверхности и частично отражаются от нее. В основном рассматривают только граничные условия.

При этом для уравнения выдвинуто граничное условие (уравнение 5):

$$D_z \frac{\theta C}{\theta Я} + \omega C = \beta C \quad (5)$$

К данной группе моделей относится методика расчета рассеивания выбросов загрязняющих веществ, которая утверждена законодательно по приказу Минприроды России от 06.06.2017 №273 «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе». Данная методика основана на решении уравнения турбулентной диффузии при введении ряда допущений. Данное уравнение интегрируют и получают уравнение для расчета максимальной приземной концентрации загрязняющего вещества. В методике применяется принцип суперпозиции, согласно которому общая концентрация загрязняющего вещества равна сумме концентраций данного загрязняющего вещества от каждого источника примеси [3].

Приказ от 06 июня 2017 года «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе» (Далее МРР-2017) выпущен для замены Общесоюзного нормативного документа «Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий», который был введен в 1987 году. Документ обновлен не только в части текстов, но и в формулах расчета. Таким образом, например, обновлена формула расчета максимальной приземной разовой концентрации загрязняющих веществ при выбросе газовой смеси из одиночного точечного источника с круглым устьем при опасной скорости ветра на определенном расстоянии от источника выброса (формула 6) [3].

$$C = \frac{A \cdot M \cdot F \cdot t \cdot n \cdot \eta}{H^2 \cdot \sqrt[3]{V_1 \cdot \Delta T}} \quad (6)$$

где A – коэффициент, зависящий от температурной стратификации атмосферы, определяющий условия горизонтального и вертикального рассеивания загрязняющих веществ в атмосферном воздухе;

M – масса загрязняющих веществ, выбрасываемого в атмосферный воздух в единицу времени (мощность выброса), г/с;

F – безразмерный коэффициент, учитывающий скорость оседания загрязняющих веществ (газообразных и аэрозолей, включая твердые частицы) в атмосферном воздухе;

m и n – безразмерные коэффициенты, учитывающие условия выброса из устья источника выброса;

η – безразмерный коэффициент, учитывающий влияние рельефа местности (определяемый в соответствии с VII данного документа);

H – высота источника, м;

V_1 – расход газовой смеси, определяемый по формуле в данном документе, м³/с;

ΔT – разность между температурой, выбрасываемой газовой смесью T_r и температурой атмосферного воздуха T_b , °С.

Данные методы расчета применяются для выполнения расчетов рассеивания выбросов загрязняющих веществ в атмосферном воздухе в двухметровом слое над поверхностью Земли на расстоянии не более 100 км от источника выброса. Так же методика расчета применима для вертикального распределения концентраций загрязняющих веществ при:

- определении нормативов выбросов загрязняющих веществ в атмосферный воздух;
- разработке перечня мероприятий по охране окружающей среды в составе разделов проектной документации;
- обосновании ориентировочных размеров санитарно-защитных зон;

- разработке и обосновании организационно-технических мероприятий, оказывающих влияние на уровень загрязнения атмосферного воздуха, при оценке их результатов;

- оценке воздействия намечаемой хозяйственной или иной деятельности на качество атмосферного воздуха;

- оценке краткосрочных и долгосрочных уровней загрязнения атмосферного воздуха и соответствующих концентраций загрязняющих атмосферу веществ, создаваемых всеми источниками выброса, исключая рассматриваемые (фоновые концентрации загрязняющих веществ).

Методика МР-2017 рекомендована для проведения расчетов нормы выбросов и для определения предельно допустимых выбросов. При этом для вычисления рассеивания загрязняющих веществ у нее присутствуют недостатки, а именно: методика не способна учитывать конкретные метеорологические условия при расчете для кратковременно действующего источника. По сути, методику сложно применить для прогнозирующих моделей в виду ограничения по использованию ее для конкретных метеорологических условий и для специфических источников [3].

Бояршинов М.Г. в работе рассмотрел решение пространственной задачи по переносу и рассеиванию примесей от движущихся автомобилей. В работе использована имитационная модель и методика основана на уравнении турбулентной диффузии в нестационарном виде. В статье описание случайного потока принято за пуассоновский процесс. В ходе эксперимента выяснили, что концентрация загрязняющих веществ не зависит от времени для длинных участков дорог и большого промежутка времени. С этим ограничением автор сделал вывод о возможности аппроксимации нестационарного процесса выбросов загрязняющих веществ от случайных автомобилей со стационарной моделью с распределенным по всей протяженности дороги источником загрязняющих веществ постоянной мощности. В результате решение дает возможность рассчитать концентрацию загрязняющих веществ как сумму концентраций от автомобилей. По результатам математических

преобразований из уравнений получена зависимость распределения математического ожидания концентрации загрязняющих веществ от случайного потока автотранспорта. На рисунке 2 представлены кривые по результатам расчета при постоянном направлении ветра (кривая 1) и с учетом розы ветров (кривая 2) [25].

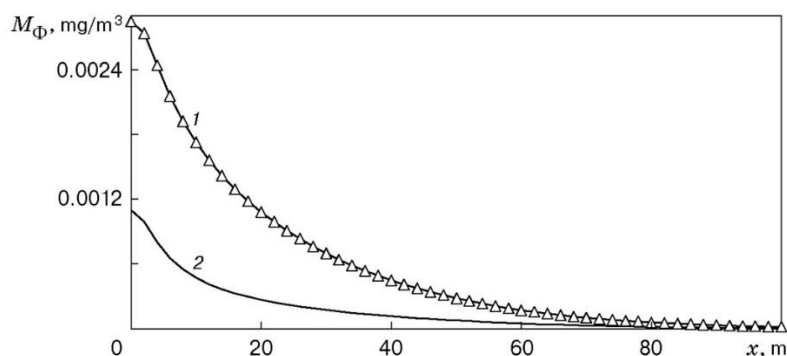


Рисунок 2 – График зависимости концентраций загрязняющих веществ от потока автотранспорта

В работе Базарского О.В., Косиновой И.И. и Фоновой С.И. так же использован подход к моделированию с использованием имитационной модели [22]. В работе авторы рассмотрели проблему загрязнения приповерхностных отложений аэрозольными частицами. Аэрозольные частицы, которые в большом количестве выбрасываются в атмосферу при буровзрывных работах, могут представлять высокую экологическую опасность, при этом выбрасываемые частицы могут иметь сильно отличающуюся плотность и размеры. В работе авторы представили математическое моделирование рассеивания аэрозольных частиц, при котором учитываются основные параметры выбрасываемых частиц и условий их рассеивания в атмосфере. Кроме того, результаты математического моделирования подтвердили экспериментальными данными, которые получили на месторождении гранитов. Конечное уравнение с учетом динамической вязкости воздуха имело вид (уравнение 7):

$$U_{2k} = \frac{9}{3 + 9 \cdot 10^{-5}/R} \left(1 - e^{-\frac{6 \cdot 10^2}{R} \left(\frac{5,4 \cdot 10^{-5}}{R} + 1,8 \right) t} \right) \quad (7)$$

где U_{2k} – скорость горизонтального переноса частиц;

R – радиус частицы;

t – время движения частицы.

Дальность осаждения частиц рассчитывали по следующей формуле (8):

$$S = U_{2k}(R) \cdot t_0 \quad (8)$$

где t_0 – время осаждения частицы.

В данном случае рассматривается движение частицы в облаке, что позволяет рассчитать ее траекторию в зависимости от ее параметров и скорости ветра. Уравнение с помощью экспериментальных данных доказывает, что большие частицы осаждаются ближе к источнику выброса, а мелкие частицы пролетают большее расстояние. В данном случае авторами принято допущения по однородности поля скорости ветра и по ровному участку местности.

1.1.3. Уравнения в частных производных

Модели с уравнениями в частных производных являются моделями, которые используют дифференциальные уравнения движения воздушной среды, т.е. уравнения Навье-Стокса, в комплексе с уравнениями диффузии и перемещения загрязняющих веществ в воздушном потоке. Кроме того, система по необходимости дополняется уравнениями теплового баланса, уравнениями, описывающими химические реакции превращения веществ в воздушном потоке, уравнениями, которые описывают движение частиц в воздушном потоке. Данная модель наиболее полно описывает процессы, происходящие в воздушном потоке, однако решение требует большой мощности ЭВМ.

Орлов С.А. в работе использовал подход к математическому моделированию с использованием частных производных. В работе рассматривается построение математической модели взаимодействия

растительности с газодинамическими потоками. Математическая модель в данной работе основана на уравнении газовой динамики [31]. В четвертой главе работы рассмотрено движение газопылевого облака с учетом турбулентной вязкости в приближении приграничного слоя. С учетом сил сопротивления деревьев лесного массива и вязкости в 4 главе данной работы представлена следующая система уравнений (уравнение 9):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{F}{\rho} + \frac{\partial}{\partial z} \left[(\varepsilon + \nu) \frac{\partial U}{\partial z} \right] \\ \frac{\partial V}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{F}{\rho} \\ \frac{\partial W}{\partial t} + U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{F}{\rho} \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W)}{\partial z} = 0 \end{array} \right. \quad (9)$$

где U, V, W – составляющие скорости ветра;

ρ – плотность;

p – давление;

t – время с начала выброса;

F – выталкивающая сила.

В ходе работы сделан вывод о снижении скорости ветра в лесозащитной полосе за счет появления в уравнениях учета вязкости. По итогу работы сформированы алгоритмы расчета и представлены компьютерные программы, которые служат для изучения рассеивания газопылевого облака с учетом геометрии лесных массивов.

1.1.4. Уравнения регрессии на основе статистических данных

Статистический тип моделей описывает основной процесс, основываясь на большом количестве информации. В основном к этому типу относятся модели, которые осуществляют статистическую обработку метеорологических данных и результатов наблюдений. По большей части такие модели

представляют собой уравнение регрессии, что является следствием регрессионного анализа большого количества данных. В качестве входных параметров служат характеристики окружающей среды: температура, скорость ветра, фоновая концентрация загрязняющих веществ, а выходным параметром будет являться концентрация загрязняющих веществ выброса. Таким образом реализуется описание зависимости концентраций от входящих параметров уравнения.

В исследовании Антропова К.М. рассмотрено математическое моделирование загрязнения атмосферного воздуха мегаполиса и промышленного центра выбросами автотранспорта и промышленных предприятий [21]. В ходе работы проведена разработка регрессионных картографических моделей рассеивания загрязняющих веществ на расстоянии около 10 метров и анализ данных моделей. Для моделирования автор использовал данные по концентрации окислов азота и построение модели было начато с двухфакторного анализа, в ходе которого найдены коэффициенты корреляции Пирсона и Спирмена между концентрацией загрязняющего вещества и предикторами уравнения. Для дальнейшего моделирования автором предложена переменная Road с помощью которой отображается описание сети автомобильных дорог. С помощью алгоритма полного перебора всех возможных вариантов выбран наиболее адекватный вариант новой переменной (рисунок 3).

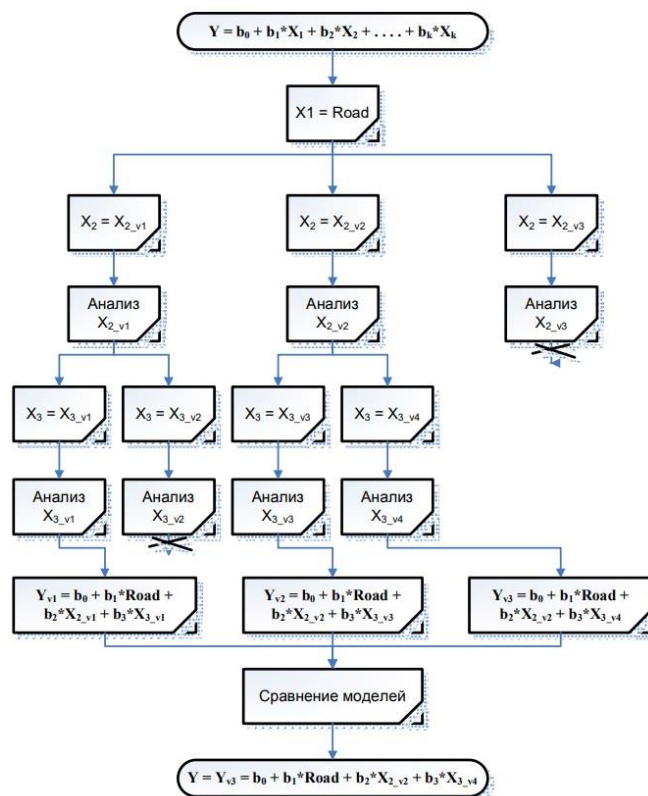


Рисунок 3 – Алгоритм построения модели рассеивания

В ходе расчетов автором найдена оптимальная модель для переменной Road, которая имела максимальное значение критерия регулярности.

Модель рассеивания загрязняющих веществ далее строилась с использованием новой переменной и уравнение регрессии имело вид уравнения первого порядка.

По результатам расчетов выбрана модель, которая содержит только две переменные: Road – влияние дорожной сети города, Veg_400 – оценка растительности и плотности застройки.

В работе использован метод Land Use Regression, который создан в Европе для оценки влияния на здоровье населения загрязнения воздуха от автомобильных дорог. Алгоритм моделирования с использованием данной модели включает несколько этапов представленных на рисунке 4.



Рисунок 4 – Алгоритм моделирования методом Land Use Regression

К преимуществам данного метода можно отнести следующее:

- возможность использования измерений от фиксированных мест отбора проб и от мобильных точек отбора;
- возможность моделировать любой тип загрязняющего вещества на любом расстоянии;
- модель может отражать краткосрочные и долгосрочные тренды;
- возможность моделировать индивидуальные источники выбросов.

Данная модель так же имеет ограничения по использованию:

- невозможно моделировать рассеивание на расстоянии менее 10 м;
- невозможно провести оценку абсолютных концентраций, что не дает возможности провести постоянный мониторинг с помощью данной модели;
- моделируется только итоговая концентрация загрязняющих веществ;
- затруднено включение в модель корреляций с метеорологическими параметрами;

– модель специфична, то есть используется только для данной области расчета.

Барикаева Н.С. в работе «Совершенствование системы мониторинга загрязнения воздуха придорожных территорий городов мелкодисперсной пылью» так же использовала моделирование с использованием уравнения регрессии [23]. Для моделирования рассмотрены зависимости общей концентрации пыли вблизи магистралей от скорости ветра, от влажности атмосферного воздуха и от интенсивности движения автотранспорта. При этом корреляции для концентраций взвешенных частиц имеют вид уравнений 10 и 11:

$$C_n = 0,169 + 0,006V - 0,0018\varphi + 0,00012N \quad (10)$$

$$PM_{10} = 0,103 + 0,0084V - 0,00098\varphi + 0,00014N \quad (11)$$

где C_n – концентрация пыли в атмосферном воздухе, мг/м³;

PM_{10} – концентрация частиц диаметром менее 10 мкм, мг/м³;

V – скорость ветра, м/с;

φ – влажность атмосферного воздуха, %;

N – интенсивность движения транспорта по автомагистрали, авт./ч.

Для данных уравнений коэффициент множественной корреляции равен 0,937 и 0,952, что показывает высокую тесноту связи факторов. Данная работа рассматривает рассеивание загрязняющих веществ вдоль автомобильных дорог на расстоянии менее 10 м, что означает отсутствие учета наличия озеленения и геометрии застроек.

Для г. Волгоград так же выполнена работа по предложению метода оценки загрязнения воздушной среды города, основанной на принципах биосферной совместимости. Модель выведена на основе уравнений, описывающих среднебалансовую концентрацию загрязняющих веществ для одной группы суммации, которое учитывает объем воздуха в жилой зоне и

коэффициент рельефа местности, и матрицы взаимовлияния районов города и прилегающих территорий к району. Полученная модель имеет в качестве искомого параметра среднебалансовый интегральный критерий загрязнения атмосферы района J , который находится путем суммирования отношения концентрации группы загрязняющих веществ к их ПДК (уравнение 12).

$$J_i = \sum_{k=1}^i \left(\frac{C_i^k(v, \phi)}{\text{ПДК}_k} \right) \quad (12)$$

где C_i^k – средняя концентрация вредных веществ по k -ой группе суммирования в i -районе;

ПДК $_k$ – ПДК k -го загрязняющего вещества.

В данной работе представлена упрощенная математическая модель переноса загрязняющих веществ между районами, которая позволяет сделать быструю оценку загрязнения атмосферы. В работе проведен анализ переноса загрязняющих веществ между районами за 3 года, в следствие чего разработана программа для ЭВМ. На основе модели предложена методика выбора альтернативных площадок для размещения предприятий. Данный поиск основан на вычислительном эксперименте и алгоритм представлен на рисунке 5. Данная методика может применяться только для крупномасштабной оценки экологического влияния при размещении новых промышленных комплексов и не может использоваться для прогнозирования рассеивания загрязняющих веществ в городских районах [23].

В работе Богомолова С.А. представлена оценка пылевого загрязнения атмосферы урбанизированных территорий с учетом плотности застройки для г. Волгограда с помощью уравнения регрессии [24].

На рисунке 5 представлен алгоритм поиска альтернативных площадок для предприятий.



Рисунок 5 – Алгоритм поиска альтернативных площадок для предприятий.

В исследовании предложена разделить территории города на зоны с одинаковыми значениями коэффициента плотности застройки. Математическая модель основана на статистической обработке экспериментальных данных за 4 года методом многофакторного регрессионного анализа.

Входными параметрами уравнения выбраны: расход газовой смеси, $\text{м}^3/\text{с}$ (X_1); C – концентрация пыли в газовой смеси на входе в рукавный фильтр, $\text{мг}/\text{м}^3$ (X_2); h – высота рельефных выпуклостей фильтрующего материала, мм (X_3), а входными параметрами взяты: эффективность улавливания пыли, η , %, и аэродинамическое сопротивление, ΔP , Па.

В результате получены два адекватных уравнения 13,14:

$$\eta = 97,8 - 1,75 \left(\frac{Q - 1700}{500} \right) - 0,37 \left(\frac{C - 4}{3} \right) + 37,69 \left(\frac{h - 10}{2} \right) \quad (13)$$

$$- 1,34 \left(\frac{Q - 1700}{500} \right)^2 + 1,34 \left(\frac{C - 4}{3} \right)^2 - 0,15 \left(\frac{h - 10}{2} \right)^2$$

$$\Delta P = 1927,58 + 10,01 \left(\frac{Q - 1700}{500} \right) + 36,56 \left(\frac{C - 4}{3} \right) + 172,07 \left(\frac{h - 10}{2} \right) \quad (14)$$

$$- 32,38 \left(\frac{Q - 1700}{500} \right) \left(\frac{C - 4}{3} \right) - 7,65 \left(\frac{Q - 1700}{500} \right) \left(\frac{h - 10}{2} \right)$$

$$+ 14,28 \left(\frac{h - 10}{2} \right)^2$$

Общее уравнение регрессии для концентрации мелкодисперсных частиц с зависимостью от температуры воздуха, влажности воздуха, скорости ветра, коэффициента плотности застройки и удельной нагрузке загрязнения пылью воздуха, рассматриваемой зоны (уравнение 15):

$$C = 1,801 - 0,004T + 0,058W - 0,198V - 0,0002K_n + 0,15P \quad (15)$$

Полученное уравнение регрессии позволяет рассчитывать рассеивание пыли в атмосфере и прогнозировать рассеивание, что является преимуществом, однако в виду того, что модель основана на статистической обработке данных, то модель специфична и может использоваться только в определенной местности.

1.1.5. Дифференциальные уравнения Лагранжа

Данный тип моделей служит для расчета траектории рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере при учете детерминированных и стохастических эффектов. Траектория рассеивания рассчитывается на основе дифференциальных уравнений, а не частных дифференциальных уравнений, что упрощает вычислительную задачу и позволяет избежать пространственных ошибок [2]. Итогом расчета является распределение большого числа частиц, что дает оценку концентрации.

Данный подход эффективен для малых расстояний. Уравнение траектории одной частицы представляет собой дифференциальное уравнение вида (формула 16):

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} + \vec{v}_1,$$

где \vec{r} – положение частицы;

\vec{v} – детерминированная скорость частицы;

\vec{v}_1 – вектор турбулентных колебаний ветра.

Турбулентную флуктуацию часто оценивают, как случайное рассеивание, описываемое уравнением Ланжевена (уравнение 17):

$$dw_t = -\frac{W_t}{T_L} dt + \sqrt{\frac{2\sigma_w^2}{T_L}} dW \quad (17)$$

где w_t – вертикальная турбулентная флуктуация;

T_L – шаг времени интегрирования по Лагранжу;

σ_w – вертикальная турбулентная скорость флуктуации;

dW – представляет процесс белого шума со средним нулем и дисперсией dt .

Лагранжева временная шкала T_L является ключевым параметром и часто задается явно или вычисляется по флуктуациям скорости.

Численное представление процесса белого шума в уравнении Ланжевена требует эффективного генератора случайных чисел, который может значительно увеличить вычислительную затратность модели.

Физические уравнения данного метода представлены в таком виде, чтобы моделировать динамику процессов в узлах сетки. При этом берется вертикальная и горизонтальная решетки, в ячейках которой происходит обмен

загрязняющими веществами. Данная сетка не имеет привязки к географическим координатам. Химические реакции в данном случае так же могут быть учтены с помощью добавочного изменения концентраций на каждом этапе расчетов.

1.1.6. Уравнения Эйлера

Модель основана на уравнении сохранения массы, которое составляется для каждого конкретного загрязняющего вещества. Также, как и в модели Лагранжа в методе используется пространственная решетка, но в данном случае сетка неподвижна и имеет привязку к реальным географическим координатам. Суть расчета по данной модели состоит в одновременном расчете соответствующих уравнений во всех ячейках решетки с учетом обмена загрязняющими веществами между ячейками во всех узлах решетки [27].

1.2. Расчетные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере

1.2.1. Унифицированная программа расчета загрязнения атмосферы «Эколог»

Программа реализована на базе методики ОНД-89, которая имеет дополнения в виде учета застроек [28]. Данная программа имеет несколько модулей расчета:

- базовый модуль для расчета приземных концентраций загрязняющих веществ;
- ГИС-Стандарт для осуществления работы с графическими материалами;
- застройка и высота для учета влияния застройки и расчета концентраций на произвольной высоте;
- расчетный блок НОРМА 4.0 позволяет подобрать оптимальное предложение для снижения выбросов от источников до требуемого уровня;

- расчетный блок ГАЗ позволяет произвести расчеты концентраций от труб компрессорных станций газопроводов;
- расчетный блок СРЕДНИЕ 4.0 позволяет провести расчет осредненных концентраций загрязняющих веществ по методике дополнения к ОНД-86;
- расчетный блок РИСКИ 4.0 позволяет произвести оценку рисков для здоровья человека.

Программа представляет расчеты в виде трех типов данных, которые синхронизированы между собой:

- картографический тип;
- иерархический тип;
- табличный тип.

Также учитывается фоновая концентрация, которая может быть рассчитана без учета вклада отдельного источника.

1.2.2. Модель ADAM (Air Force Dispersion Assessment Model)

Модель представляет собой гауссовскую модель дисперсии, которая учитывает параметры термодинамики, химии, теплопередачи и плотности газов [3].

ADAM — это инструмент моделирования Европейской комиссии (ЕК) для оценки последствий химических аварий, разработанный и управляемый Бюро по опасностям крупных аварий Объединенного исследовательского центра ЕС. Этот инструмент предназначен для рассмотрения общего цикла оценки последствий промышленной аварии, включая непреднамеренный выброс опасного вещества (в том числе с тепловым излучением от химических пожаров, взрывными эффектами взрывов паровых облаков и вдыханием паров токсичных химических веществ).

Общая структура ADAM состоит из трех взаимосвязанных вычислительных модулей: исходный термин, физические эффекты и уязвимость.

Первый модуль относится к реализации моделей для расчета источника, то есть оценки количества выбрасываемого вещества и связанных с ним параметров, полностью характеризующих процесс выброса. Эта оценка требует знания типа и количества вещества, вовлеченного в сценарий аварии, физических условий и условий хранения, типа и способа разрыва, времени выброса, если оно ограничено вмешательством оператора, и условий окружающей среды.

Второй модуль использует результаты первого модуля для оценки эффектов, возникающих в результате разгерметизации и последующей последовательности событий, с точки зрения, в зависимости от вещества, концентрации токсичного вещества после рассеивания в воздухе, теплового излучения химического вещества, пожара или избыточного давления от взрыва облака пара.

Третий модуль предназначен для преобразования физического воздействия, рассчитанного вторым модулем, в воздействие на окружающую среду с использованием уровней летальности или ущерба. Обычно это достигается с помощью функций или, в качестве альтернативы, эталонных порогов, таких как критерии защитного действия для ингаляционной токсичности или других эмпирических средних критериев для пожаров и взрывов.

1.2.3. Модель AERMOD

Модели рассеивания загрязнения воздуха являются одним из важных инструментов системы управления качеством воздуха. Их приложения включают оценку воздействия источников выбросов на качество воздуха для получения разрешения на выброс газов и пыли в воздух. Дисперсионные модели используются для оценки качества атмосферного воздуха, определения доли выбросов от различных источников в общем загрязнении атмосферного воздуха или определения основных направлений действий, направленных на снижение выбросов. Также проводятся многочисленные исследования по развитию, ключевой целью которых является анализ чувствительности

применяемых исходных данных для улучшения результатов прогнозов концентраций загрязняющих веществ в воздухе [24].

Система моделирования рассеивания загрязняющих веществ в воздухе AERMET/AERMOD является одной из самых узнаваемых и популярных моделей, применяемых для оценки воздействия на качество воздуха в локальном масштабе (<50 км). AERMOD был разработан в сотрудничестве с Американским метеорологическим обществом (AMS) и Агентством по охране окружающей среды США (US EPA). В 1991 году они начали сотрудничество с целью реализации концепций планетарного пограничного слоя в моделях рассеяния загрязняющих веществ в воздухе, особенно в нестабильных атмосферных условиях. Первая формулировка модели AERMOD была представлена в 1996 году. Оценка развития проводилась с использованием пяти баз данных оценки дисперсионной модели. В 2000 году Агентство по охране окружающей среды США предложило модель AERMOD в качестве замены модели ISC3, а в 2005 году AERMOD официально заменил более раннюю модель ISC3. В настоящее время модель AERMOD постоянно развивается и поддерживается, а ее оценка проводится на основе 17 наборов экспериментальных данных. В соответствии с последним обновлением руководств по моделированию качества воздуха модель AERMOD рекомендуется для целей регулирования в локальном масштабе как на равнинной, так и на сложной местности. В 2017 г. был выпущен «Меморандум: официальные документы EPA о планируемых обновлениях системы моделирования AERMOD», который включал наиболее важные направления развития модели. Основные вопросы, рассматриваемые в белой книге модели AERMOD, заключаются в следующем: склонность модели к завышенным прогнозам в условиях слабого ветра, обработка влажных шлейфов, алгоритмы нисходящего потока, методы моделирования NO₂, моделирование мобильных источников и моделирование над водой [14].

Одной из основных характеристик моделей рассеяния загрязнения воздуха является необходимость предоставления входных данных временного

ряда. Неопределенность входных данных может определять точность полученных результатов моделирования (параметрическая неопределенность модели). Поэтому необходимо провести исследования, направленные на определение неопределенности для выбранных моделей рассеивания загрязнителей воздуха с использованием различных исходных данных. Одним из наиболее важных наборов входных данных, обрабатываемых моделями качества воздуха в случае приложений со сложным рельефом, является цифровая модель рельефа. В последние несколько лет наблюдается интенсивное развитие сбора данных о земле с помощью методов дистанционного зондирования.

1.2.4. AFTOX (Air Force Toxic Chemical Dispersion Model)

Модель химической дисперсии AFTOX (Air Force Toxic) была создана Kunkel. Предполагается, что каждую минуту из источника выбрасывается четыре гауссовых импульса. Поскольку он не учитывает распад или осаждение загрязнителей, AFTOX часто обеспечивает более высокие концентрации загрязняющих веществ и более низкую точность по сравнению с другими типами моделей. AFTOX ограничен газами с нейтральной плавучестью, но особенно полезен для моделирования жидких разливов, которые впоследствии испаряются [30].

AFTOX недавно был использован в качестве основы для моделирования, исследующего взаимосвязь между размером капель дождя и эффективностью поглощения аэрозольных частиц.

1.2.5. CALINE (California Line Source Dispersion Model)

Калифорнийское министерство транспорта (Caltrans) опубликовало свою первую модель рассеивания линейных источников для прогнозирования концентраций монооксида углерода (CO) в 1972 г.. Проверка модели с использованием предварительных полевых наблюдений не дала результатов. В 1975 году оригинальная модель была заменена обновленной версией CALINE2. Новая модель позволила рассчитать концентрации для депрессивных участков и для ветров, параллельных проезжей части. Последующие исследования

показали, что CALINE2 серьезно завышал прогноз концентрации для стабильных условий параллельного ветра. В 1979 г. была разработана третья версия модели. Эта версия, CALINE3, сохранила базовую методологию дисперсии Гаусса, но использовала новые кривые вертикальной и горизонтальной дисперсии, модифицированные с учетом эффектов шероховатости поверхности, времени усреднения и турбулентности, вызванной транспортным средством. Он также заменил модель виртуального точечного источника, используемую в CALINE2, на эквивалентный конечный линейный источник и добавил в формат модели возможности множественной связи. Изменения помогли уменьшить величину и частоту завышенных прогнозов для стабильных условий параллельного ветра. Производительность CALINE3 была оценена несколькими независимыми исследователями и признана сопоставимой с другими опубликованными моделями линейных источников. В 1980 году Агентство по охране окружающей среды (EPA) разрешило использовать CALINE3 для оценки концентраций нереакционноспособных загрязнителей вблизи автомагистралей [5, 8, 30].

CALINE4 — самая последняя версия серии CALINE. Он представляет собой усовершенствование и расширение возможностей, содержащихся в CALINE3. С помощью модели можно предсказать концентрации CO, диоксида азота (NO_2) и аэрозолей. В модели используется модифицированный метод гауссового шлейфа, аналогичный тому, который используется в CALINE3, но с новыми положениями для бокового распространения шлейфа и тепловой турбулентности, вызванной транспортным средством. Включены подмодели для модальных выбросов CO и химического состава шлейфа.

1.2.6. CALPUFF

CALPUFF — это передовая интегрированная система моделирования лагранжевых шлейфов для моделирования рассеивания атмосферных загрязняющих веществ, распространяемая Группой атмосферных исследований компании TRC Solutions [15, 27, 30].

Модель была принята Агентством по охране окружающей среды США (EPA) в его Руководстве по моделям качества воздуха в качестве предпочтительной модели для оценки переноса загрязняющих веществ на большие расстояния и их воздействия на территории федерального класса I и в каждом конкретном случае и для некоторых применений ближнего диапазона, связанных со сложными метеорологическими условиями.

Интегрированная система моделирования состоит из трех основных компонентов и набора программ предварительной и постобработки. Основными компонентами системы моделирования являются CALMET (диагностическая трехмерная метеорологическая модель), CALPUFF (модель дисперсии качества воздуха) и CALPOST (пакет постобработки). Каждая из этих программ имеет графический пользовательский интерфейс (GUI). В дополнение к этим компонентам существует множество других процессоров, которые можно использовать для подготовки геофизических данных во многих стандартных форматах, метеорологических данных (данные о поверхности, верхних слоях атмосферы, осадках и данных с буев) и интерфейсов с другими моделями, такие как мезомасштабная модель Penn State/NCAR (MM5), эта модель Национального центра экологического прогнозирования (NCEP) и метеорологическая модель RAMS.

Модель CALPUFF предназначена для имитации рассеивания плавучих, затяжных или непрерывных точечных и площадных источников загрязнения, а также рассеивания плавучих непрерывных линейных источников. Модель также включает алгоритмы для обработки эффекта смыва близлежащими зданиями на пути шлейфов загрязнения.

1.2.7. HOTMAC/RAPTAD

Модель турбулентности высшего порядка для атмосферной циркуляции (HOTMAC), разработанная Лос-Аламосской национальной лабораторией, представляет собой мезомасштабную атмосферную модель для прогнозирования трехмерного распределения скорости ветра, направления ветра, температуры, водяного пара и турбулентности на сложной местности.

Управляющие уравнения НОТМАС основаны на уравнениях сохранения массы, импульса, внутренней энергии, соотношения смешивания водяного пара и кинетической энергии турбулентности. Она может учитывать ночные дренажные потоки, конвективные потоки вверх по склону и теневой эффект солнечной короткой волны, которые относительно важны, поскольку все атомные электростанции на Тайване расположены напротив горы, обращенной к океану. В модели НОТМАС используется метод вложенных сеток, что позволяет нам рассмотреть конкретную область вокруг атомных электростанций в более мелких деталях лишь с умеренным увеличением вычислительных затрат. Атмосферное моделирование НОТМАС применялось в некоторых исследованиях переноса загрязняющих веществ, и было доказано, что оно успешно моделирует поле ветра в суровых погодных условиях [17].

Модель Random Puff Transport and Diffusion (RAPTAD) представляет собой трехмерную модель лагранжевого шлейфа, основанную на методе случайных перемещений. Он используется для расчета переноса и диффузии переносимых по воздуху материалов. Исходными входными данными, необходимыми для имитации шлейфа, являются ветровые условия и параметры турбулентности, предоставляемые НОТМАС. При работе с непрерывным выпуском исходный шлейф делится на ряд отдельных шлейфов, которые можно моделировать отдельно. Впоследствии распределение концентрации в любой момент времени вычисляется путем суммирования всех этих отдельных шлейфов [7], [18].

Система моделирования НОТМАС/RAPTAD особенно полезна для прогнозирования процессов переноса и диффузии на сложной местности, где традиционные методы не работают. Ранее она была протестирована на наборах метеорологических и трассерных данных с хорошими результатами. Были сравнены результаты, предсказанные моделью, с данными, собранными в ходе эксперимента по диффузии и обнаружено, что предсказания НОТМАС/RAPTAD потенциально лучше, чем предсказания, полученные с помощью диагностических и эмпирических моделей. Таким образом, эта

расширенная возможность прогнозирования дает нам надежду на более точную оценку распределения доз.

1.2.8. Модель DEGADIS (dense gas dispersion)

Модель DEGADIS была первоначально разработана для Береговой охраны США и Института газовых исследований в первую очередь для моделирования рассеивания криогенных горючих газов. Последующая работа, спонсируемая Агентством по охране окружающей среды США, расширила применения DEGADIS для моделирования рассеивания вертикальных потоков. Внедрение DEGADIS на персональном компьютере спонсировалось Институтом газовых исследований и Американским институтом нефти [19].

DEGADIS моделирует атмосферное рассеивание загрязняющих веществ в виде газа (или аэрозоля), расположенного на возвышении или на уровне земли, более плотного, чем воздух, газа (или аэрозоля), выбрасываемого либо с незначительным импульсом, либо в виде потока в пограничный слой атмосферы над плоской, беспрепятственной местностью. DEGADIS моделирует процессы диспергирования, сопровождающие гравитационный поток, вынос загрязняющих веществ в пограничный слой атмосферы и последующее распространение выброса по ветру. DEGADIS также учитывает отражение от земли, когда нижняя граница шлейфа достигает уровня земли (рисунок 6).

DEGADIS имеет ограниченные возможности для реализации сценариев выброса на сложной местности. Это ограничение имеет большое значение, поскольку особенности рельефа влияют на траекторию и конечный перенос выброса плотного газа.

DEGADIS в настоящее время предполагает только вертикальные потоки.

DEGADIS предполагает беспрепятственное поле атмосферного потока. Модель потока/шлейфа предполагает логарифмический профиль ветра, а неструйная модель на уровне земли предполагает степенной профиль ветра, который согласуется с логарифмическим профилем ветра. Применение модели

следует ограничивать выпусками, в которых глубина диспергирующего слоя значительно превышает высоту элементов шероховатости поверхности.

На рисунке 6 представлена схема шлейфа модели DEGADIS

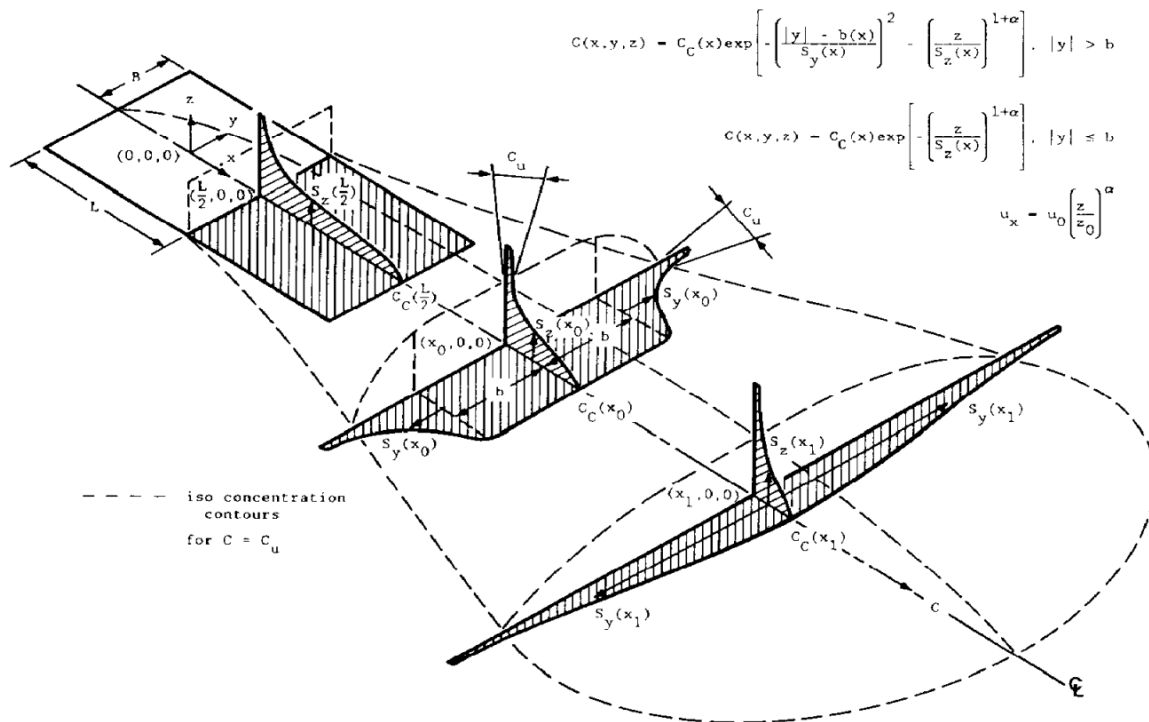


Рисунок 6 – Схема шлейфа модели DEGADIS

Для кратковременных выбросов загрязняющих веществ, когда продолжительность выброса короче, чем время усреднения, связанное с опасными уровнями концентрации (например, 10 минут для предела кратковременного воздействия), DEGADIS не обеспечивает усреднение времени концентрации в направлении ветра.

Сильные стороны модели в том, что она может учитывать широкий спектр элементов шероховатости поверхности.

Ограничения модели состоят в том, что: не учитывает положительную тепловую плавучесть (т. е. подъем шлейфа); не способна учитывать сложные явления метеорологических потоков (например, горно-долинные потоки, морские бризы); не учитывает аэродинамические эффекты близлежащих зданий; не учитывает эффекты сухого или влажного осаждения; может касаться

только чисто химических выбросов; не рассматривает химические смеси или химические превращения; является только детерминированной моделью и не может использовать прогностические данные.

Восемь входных переменных DEGADIS – класс устойчивости, скорость ветра, размер разлива, продолжительность выброса, плотность газа, шероховатость грунта, разность температур химического основания, коэффициенты уравнения состояния и степень беспокойства – были изменены в 24 сценариях в порядке исследования, чтобы охватить ожидаемую изменчивость в параметрах модели. Эти факторы являются наиболее важными факторами, влияющими на оценки концентрации, сделанные DEGADIS. Модель имитирует только один набор метеорологических условий, и поэтому ее не следует считать применимой к периодам времени, намного превышающим 1 или 2 часа. DEGADIS можно использовать в качестве усовершенствованного подхода к моделированию для оценки краткосрочных концентраций в окружающей среде (время усреднения 1 час или меньше) и ожидаемой области воздействия концентраций, превышающих указанные пороговые значения для выбросов токсичных химических веществ. Это особенно полезно в ситуациях, когда предполагается, что влияние плотности имеет большое значение, и когда скрининговые оценки концентраций в окружающей среде превышают опасные уровни.

1.2.9. Модель RASCAL (Radiological Assessment Systems for Consequence AnaLysis)

Система радиологической оценки для анализа последствий (RASCAL) была разработана для Комиссии по ядерному регулированию США. Она предназначена для использования при независимой оценке прогнозов дозы во время реагирования на радиологические аварийные ситуации. RASCAL используется персоналом реагирования для проведения независимой оценки доз и предполагаемых последствий, а также для обучения и учений. Она позволяет учитывать доминирующие аспекты источника, переноса, дозы и

последствий и дополняет оценки, основанные на условиях станции и окружающей среды.

RASCAL 4.3 состоит из семи инструментов. Четыре инструмента предназначены для использования при оценке последствий. Эти инструменты включают в себя: Source Term to Dose (STDose), Field Measurement to Dose (FMDose), средство просмотра радионуклидных данных и калькулятор распада. STDose и FMDose являются основными инструментами, используемыми для оценки доз. Средство просмотра радионуклидных данных предоставляет пользователям прямой доступ к базе данных радионуклидов RASCAL, которая содержит информацию о коэффициентах преобразования распада и дозы. Калькулятор распада — это устаревший код, который предоставляет пользователям оценки активности в цепочке распада родительского радионуклида в некоторый момент времени с учетом активности родительского радионуклида в нулевое время. Три оставшихся инструмента обеспечивают гибкость использования RASCAL 4.3. Базовый файл создания инвентаризации позволяет пользователям использовать инвентаризации активной зоны реактора и теплоносителя в оценках последствий, основанных на эксплуатации конкретного реактора, вместо стандартных инвентаризаций в конце цикла путем создания файла, содержащего соответствующие сведения о работе реактора. Инструмент Source Term Merge/Export предоставляет пользователям метод обработки одновременных аварий на нескольких объектах на объекте. Его также можно использовать для экспорта исходного термина RASCAL 4.3 для использования другими организациями. Наконец, инструмент Configure Met Downloads используется для настройки автоматического получения метеорологических наблюдений и прогнозов из Интернета для использования в STDose.

Используя принцип суперпозиции, одномерное решение уравнения диффузии расширяется до трех измерений, чтобы получить базовую модель гауссового рассеивания. В декартовой системе координат с осями x и y в

горизонтальной плоскости и z в вертикальной нормированная концентрация вблизи выброса. Используемое в основе уравнение 18:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi^{2/3}\sigma_x\sigma_y\sigma_z)} \cdot \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}\right] \times \exp\left[-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right] \cdot \exp\left[-\frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_z^2}\right] \quad (18)$$

Это уравнение в сочетании с транспортным механизмом для перемещения центра потока (x_0, y_0, z_0) представляет собой упрощенную версию модели потока в RASCAL 3.0.5. Параметры дисперсии показаны как функции направления от центра потока. Однако в большинстве реализаций модели потока предполагается, что поток симметричен в направлениях x и y . Следовательно, x и y можно заменить горизонтальным расстоянием r от центра потока выброса [37].

Вывод по разделу.

В ходе литературного обзора рассмотрены методы расчета рассеивания загрязняющих веществ. Для моделирования рассеивания применяют разные методики расчета. Основными факторами, которые влияют на рассеивание загрязняющих веществ, являются три основные группы: характеристика источника загрязнения, характеристика территории, метеорологические параметры. В настоящее время разработано несколько моделей с различными ограничениями, так как одни и те же функции для одного и того же типа источника могут отличаться в зависимости от типа устойчивости атмосферы и скорости ветра.

Приоритетно в настоящее время используются две методики, рекомендованные для расчета распределения загрязняющих веществ. Первая – это является Приказ от 06 июня 2017 года «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе». И вторая – Гауссова модель, разработанная Пасквиллом.

Отдельно выделяют модели для нестационарных источников загрязнения. Для учета неоднородности поверхности при расчете нестационарной модели выброса используют полуэмпирические уравнения МАГАТЭ. Данные модели позволяют произвести расчет траектории и времени движения облака загрязняющих веществ в нужных метеорологических условиях или до падения концентрации.

В целом модели расчета можно разделить на четыре основные группы:

- модели на основе распределения Гаусса;
- имитационные модели;
- модели с уравнениями в частных производных;
- статистические модели.

Наиболее применяемым уравнением является уравнение рассеивания Гаусса, поскольку уравнение дает описание нормальному распределению функции в трех плоскостях и является более универсальным и удобным в применении. Данное уравнение имеет ограничения, связанные с учетом рельефа, наличием ветра и максимальным расстоянием (до 10 км), однако на основе данного уравнения построены несколько моделей высокого уровня. Данные модели сочетают в себе уравнение рассеивания Гаусса и ограничения Лагранжа, поэтому в модели появляются поправки на время и расчет включает в себя три профиля по плоскостям. В этом случае ограничение по расстоянию изменяется до 100 км.

Уравнение турбулентной диффузии является основой методики расчета рассеивания выбросов загрязняющих веществ, которая утверждена законодательно по приказу Минприроды России от 06.06.2017 №273 «Об утверждении методов расчетов рассеивания выбросов вредных (загрязняющих) веществ в атмосферном воздухе». Данная методика не может учитывать конкретные метеорологические условия, в следствие чего ее невозможно использовать для кратковременных расчетов концентраций или расстояния. В данном случае необходимо учитывать погодные условия.

Модели с уравнениями в частных производных являются моделями, которые используют дифференциальные уравнения движения воздушной среды в комплексе с уравнениями диффузии и перемещения загрязняющих веществ в воздушном потоке. Система уравнений так же по необходимости дополняется уравнениями теплового баланса, уравнениями, описывающими химические реакции превращения веществ в воздушном потоке, уравнениями, которые описывают движение частиц в воздушном потоке. Данная модель наиболее полно описывает процессы, происходящие в воздушном потоке, однако решение требует большой мощности ЭВМ, что так же увеличивает время и трудозатратность расчетов.

Уравнения регрессии на основе статистических данных являются простым математическим описанием рассеивания загрязняющих веществ в конкретных случаях в определенных условиях. Данная модель может работать только при наличии абсолютно идентичных условий и поэтому данное уравнение не может быть применено для исследования, поскольку необходимо в уравнении иметь зависимость от метеорологических данных.

При рассмотрении моделей распространения загрязняющих веществ в атмосфере проведен обзор некоторых моделей, использующих основные методы расчета. Наиболее полезными являются модели RAPTAD, RASCAL и DEGADIS, так как они используют в качестве основного уравнения гауссовское распределение и имеют ограничения в использовании до 100 км, что достаточно подходит для цели исследования.

С учетом анализа проведенного литературного обзора и исходя из найденных ограничений моделей для расчета была выбрана модель на основе уравнения Гаусса, так как уравнение использует информацию в трех основных плоскостях, что дает оценку потока рассеивания наиболее точно при применении ее в заданных ограничениях.

2. Экспериментальная часть

2.1. Анализ состояния атмосферного воздуха на территории г.о. Тольятти.

2.1.1. Основной перечень загрязняющих веществ и определение параметров, влияющих на рассеивание.

Загрязняющие вещества классифицируются на несколько групп по степени воздействия на организм человека в зависимости от предельно допустимой концентрации, при которой на протяжении 8 часов в рабочие дни и не более 41 часа в неделю в течение всего рабочего стажа не возникнут заболевания или отклонения в состоянии здоровья:

- ПДК $< 0,1$ мг/м³ первый класс опасности (свинец, ртуть – 0,001 мг/м³);
- ПДК = 0,1...1 мг/м³ второй класс опасности (хлор 0,1 мг/м³, серная кислота 1 мг/м³);
- ПДК = 1,1...10 мг/м³ третий класс опасности (метанол 5 мг/м³, дихлорэтан 10 мг/м³);
- ПДК > 10 мг/м³ четвертый класс опасности (аммиак 20 мг/м³, ацетон 200 мг/м³, бензин 300 мг/м³, этанол 1000 мг/м³).

Так же загрязняющие вещества нормируются величиной предельно допустимого выброса, которая устанавливается индивидуально для каждого источника выброса с учетом возможных эффектов суммации в данном районе.

К основным веществам, контролируемым на территории городов относятся: оксид углерода, диоксид углерода, окислы азота, сероводород, аммиак, формальдегид, углеводороды, бензол, фенол, толуол, ксилолы и взвешенные частицы.

На данный момент множество городов оснащено стационарными точкам отбора проб с автоматическими газоанализаторами, с помощью которых

производится мониторинг атмосферного воздуха и вычисления фоновой концентрации. Для промышленных городов данная задача не совсем применима, поскольку в атмосферу попадают разнообразные соединения.

Рассеивание загрязняющих веществ и загрязнение атмосферы в целом зависит от различных факторов, таких как: время года, время суток, параметров ветра, градиента температуры окружающей среды, влажности воздуха, количества атмосферных осадков, расстояния по отношению к источникам выброса загрязняющих веществ, рельефа местности, степени озеленения и других. Другими словами, рассеивание загрязнителей зависит во многом от двух параметров: источника загрязняющих веществ и метеорологических условий. Для того чтобы задать параметры источника необходимо учесть пропорциональность количества выделяемых соединений. Например, при выбросе в атмосферу пыли необходимо знать диаметр частиц для того, чтобы установить степень осаждения. Приземная концентрация загрязняющих веществ также зависит от высоты трубы, из которой осуществляется выброс. Концентрация загрязнителей зависит не только от количества загрязнителей, но и от скорости газового потока и температуры газа на выходе. При высокой температуре дымовых газов проявляется эффект термической плавучести газов. Скорость выхода газа из трубы может быть рассчитана по внутреннему диаметру дымовой трубы и объему выходящих газов, при этом проявляется динамическая плавучесть потока. Чтобы описать данные процессы газовых потоков используются эмпирические формулы. Необходимо отметить, что плавучесть газов не зависит от массы загрязняющих веществ, необходимо учитывать общую массу газового потока.

К метеорологическим факторам, влияющим на рассеивание загрязняющих веществ, относятся следующие параметры: скорость потока ветра, его направления по сторонам света, вертикальный градиент температур. Концентрация загрязняющих веществ на территории обратно пропорциональна скорости ветра на данной местности. Но чем больше скорость ветра, тем больше происходит турбулентное перемешивание. Явление инверсии препятствует

турбулентному перемешиванию, данное явление происходит в тех случаях, когда при увеличении высоты повышается температура. Самая высокая приземная концентрация наблюдается при стабильной стратификации (длительном поддержании температуры). Конвекционное явление приводит к сильному вертикальному перемешиванию, в данном случае приземные концентрации загрязняющих веществ практически минимальны.

Стандарт качества атмосферного воздуха основан на данных длительных исследований. Таким образом, необходимо проводить серию замеров так чтобы метеорологические условия совпадали и в течение равных промежутков времени. Самые оптимальные условия для качественных показателей замеры следует проводить в течение 10 лет. Если данных условий не соблюдалось, возможно, использовать более короткую серию замеров, но они должны быть репрезентативные. Необходимо провести анализ показателей на более длительном периоде, взятых на других точках наблюдения. При использовании других метеорологических показателей также должны иметь репрезентативный вид и соответствовать особенностям местности, где происходит исследование.

2.1.2. Систематизирование экспериментальных данных замеров лаборатории

В ходе работы были проанализированы данные загрязняющих веществ, выбрасываемые предприятиями Тольяттикаучук, Куйбышевазот, Тольяттиазот, представленные в работе Аладинской А.Р. Так как данные не были получены от всех источников выбросов находящейся на предприятии и не всех веществ были включены только основные загрязняющие вещества, поэтому исследование на данном этапе могут быть неполными по причине отсутствия достаточной информации по количеству выбросов и количеству выбранных веществ. В таблице 1 приведена информация о валовых выбросах, которые образуются на предприятиях г. Тольятти [26].

Таблица 1 – Валовые выбросы по основным загрязняющим веществам

Наименование вещества	Валовые выбросы (т/г)		
	ПАО «Куйбышев Азот»	ПАО «Тольятти азот»	ООО «Тольятти каучук»
Титан диоксид	0,012	-	0,01935
Оксид железа (III)	3,840	0,417741	1,24628
Кальций оксид	0,000		0,00000036
Марганец и его соединения	0,064	0,0009111	0,01188
Хром (VI)	0,044	0,000326	0,06304
Аммиак	588,4	1575,901735	119,226
Оксид азота	79,331	327,175410	91,5836
Гидрохлорид	1,080	-	0,0104
Углерод (сажа)	2,822	3,276426	3,8799
Дигидросульфид	0	0,046813	0,33414
Фтористые газообразные соединения	0,036	0,002148	0,01394
Фториды неорганические плохо растворимые	0,008	0,002888	0,00127
Кислота Ортофосфорная	0,028	-	5,4E ⁻¹⁰
Метан	55,359	127,780665	70,4883
Смесь углеводородов предельных	0,268	0,272299	5,75654
Бензол	4,279	0,026717	7,25276
Диметилбензол	6,948	0,014801	1,90646
Метилбензол	13,475	0,022843	237,783
Этилбензол	0,020	0,000684	0,00047
Бутан-1-ол (спирт н-бутиловый)	5,957	-	0,20120
Метанол	0,020	43,573719	92,3434
Этанол	4,998	6,830995	0,09911
Этоксиэтанол	2,204	-	0,06115
Бутилацетат	3,440	-	0,1448
Этилацетат	0,052	4,896461	0,00745
Формальдегид	0,069	23,404191	22,4971
Ацетон	3,72	-	7,67085
Циклогексанон	10,150	-	0,24163
Триэтаноламин	0,004	-	1,9E-07
Ацетонитрил	0	-	21,9814
Бензин	0,8	0,211159	0,7
Керосин	4,172	0,354053	7,45189
Уйт-спирит	2,34	0,000705	0,235
Алканы C ₁₂₋₁₉	0,556	0,074687	1,87
Эмульсол	0,004	0,00000034	0,0036
Взвешенные в –ва	1,824	0,005568	0,39347
Пыль неорганическая SiO ₂	0,016	2,351068	0,061
Пыль абразивная	0,276	0,012096	0,429
Пыль древесная	1,436	0,463104	4,667

Продолжение таблицы 1

Наименование вещества	Валовые выбросы (т/г)		
	ПАО «Куйбышев Азот»	ПАО «Тольятти азот»	ООО «Тольятти каучук»
Пыль тонкоизмельченного резинового вулканизата из отходов подошвенных резин	0,008	0,009764	0,04003

В ходе работы проанализированы данные отчета о научно-исследовательской работе НИЛ-13, целью которого являлось комплексное определение состава атмосферного воздуха в городском округе Тольятти. Отбор проб производился в данном случае в различных точках города. Исследование полученных проб производили с использованием газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии и других методов физико-химического анализа. При исследованиях отобранных проб обнаружены вещества характерные для промышленных выбросов: циклические кислород- и азотсодержащие соединения, α -метилстирол, стирол. Так же во всех пробах присутствуют вещества, характерные для отработанных газов автомобильного транспорта: бензальдегида, бензойной кислоты, ацетофенона и других соединений (таблица 2).

Таблица 2 – Результаты качественного анализа проб воздуха г.о. Тольятти

Наименование вещества	Фиксация наличия вещества в пробе			Превышение ПДК
	Комсомольский район	Центральный район	Автозаводской район	
Углерода оксид	+	+	+	+
Азота оксид	+	+	+	-
Азота диоксид	+	+	+	-
Аммиак	-	+	+	-
Сера диоксид	+	+	+	-
Сероводород	-	-	-	-
Взвешенные частицы	+	+	+	-
Ацетон	+	+	+	-
Изопропанол	+	+	-	-
Стирол	+	+	-	+
Формальдегид	-	-	-	-

Продолжение таблицы 2

Наименование вещества	Фиксация наличия вещества в пробе			Превышение ПДК
	Комсомольский район	Центральный район	Автозаводской район	
Бутанол	-	-	-	-
Свинец	-	-	-	-
Бензол	+	+	+	-
Пентаналь	+	-	-	-
Толуол	+	+	+	-
Гексаналь	+	+	-	-
Бутилацетат	+	+	-	-
Бензальдегид	+	+	+	-
Фенол	+	+	+	+
Кумол	+	-	-	-
Триметилбензолы	+	+	+	-
Ацетофенон	+	+	+	-
Бензойная кислота	+	+	+	-
1-этил-3-метилбензол	+	+	+	-
Нафталин	-	+	+	-
Метилнафталины	-	+	-	-
Уксусная кислота	+	+	-	-
Органические кислоты алифатического ряда	+	+	-	-
Нональ	+	+	-	-
Октаналь	+	+	-	-
α -метилстирол	-	+	-	-
Предельные углеводороды С6-11	+	+	-	-
Бенз(а)пирен	-	+	-	-
Деканаль	+	+	-	-
Капролактам	+	-	-	-
Бутанол	-	+	-	-
Циклогексан	-	+	-	-
Этилбензол	+	-	-	+
Ксилолы	+	-	-	-
Метанол	+	+	+	+

В результате анализа экспериментальных данных выявлено, что за отчетный период зафиксированы превышения ПДК по следующим веществам:

- по фенолу (превышение в 1,1 – 2,3 раза);
- по стиролу (превышение в 1,7 – 2,4 раза);
- по этилбензолу (превышение в 1,05 – 1,1 раза);
- по оксиду углерода (превышение в 1,5 раза);
- по метанолу (превышение в 1,1 раза);

- по взвешенным веществам (превышение в 1,4 – 4,7 раза).

В пределах допустимых концентраций обнаружено содержание веществ:

- азота оксиды;
- серы диоксид;
- бензол;
- толуол;
- предельные углеводороды и т.д.

Так же проанализировали отчет ФГУП «НИИ ГПЭЧ» ФМБА России о выявлении и идентификации специфических загрязнителей г.о. Тольятти. В ходе работы авторы производили отбор проб воздуха из различных точек города. С помощью хромато-масс-спектрометрии и метода ВЭЖХ с использованием флуоресцентного детектирования произведено определение специфических летучих органических соединений и количественное содержание бенз[α]пирена. По полученным данным (таблица 3) видно, что 25.11.2019 и 11.12.2019 выявлено превышение ПДК по бенз[α]пирену [26].

Таблица 3 – Результаты определения бенз[α]пирена в пробах г.о. Тольятти

№ фильтра	Дата отбора	ПДК в воздухе населенных мест, нг/м ³	Содержание бенз[α]пирена в пробах, нг/м ³
2	25.11.19	1,0	70
3	11.12.19		28
1	04.02.20		0,685

В заключении к данному отчету приведен список основных специфических загрязняющих веществ г.о. Тольятти. Основные загрязняющие вещества для г.о. Тольятти являются: ацетон, бензол, бутилацетат, стирол, метилстиролы, метилакрилат, бензальдегид, фенол, толуол, ксилолы, алкилбензолы, нафталин, бензойная кислота, ацетофенон, бензофенон, хлороформ, трихлорэтилен, четыреххлористый углерод, пиридин, фталевая кислота. Данный перечень загрязняющих веществ относится к промышленным выбросам, а также к компонентам от автомобильного топлива и продуктов его

сгорания. Кроме перечисленных соединений в воздухе обнаружены кислородсодержащие соединения: бутанол, октанол, карбоновые кислоты, альдегиды C5-12. Данные вещества могут возникать в процессе гниения бытовых отходов. Кроме того, данный процесс в основном происходит под действием бактерий, которые преобразуют органические соединения в метан и углерода диоксид.

2.2. Разработка прогностической модели для оценки качества атмосферного воздуха

Для прогнозирования выбросов загрязняющих веществ в качестве объектов выбраны производства г.о. Тольятти. Исходя из нормативной документации предприятий в отношении выбросов возможно произвести расчет отношения данного типа выброса в зависимости от погодных условий к конкретному предприятию. Так как предприятия обязуются предоставлять данные о всех характеристиках каждой точки выброса, и документация хранится в системе Роспотребнадзора, то на основании них есть возможность составления общей базы данных для вычислений выбросов загрязняющих веществ.

Исходя из математических моделей, прогнозирующих распространение концентраций загрязняющих веществ, можно определить примерное местонахождение источника с необходимым уровнем достоверности. Для этого необходимо провести ряд математических действий с готовой моделью прогнозирования. Так же необходимо ввести ряд ограничений для конкретной взятой модели.

Для преобразования за основу взято уравнение распределения Гаусса, работающее в модели RAPTAD, DEGADIS и RASCAL. В основе лежит уравнение рассеивания Гаусса и поскольку нас интересует определение неизвестного расстояния до источника выброса возможно использование ограничений Лагранжевой модель рассеивания. Комплексная модель позволяет

прогнозировать рассеивание в местности со сложным рельефом. Ограничения для данной модели выставлены по расстоянию до 100 км и по отсутствию штиля, то есть должна быть скорость ветра для расчетов [10].

2.2.1. Составление математических моделей

Стандартное уравнение рассеивания Гаусса следует из общего уравнения атмосферной диффузии, что означает:

- отсутствие привязки ко времени;
- постоянство скорости ветра;
- диффузия не зависит от направления.

Общее уравнение в этом случае принимает вид (уравнение 19):

$$q = q_0 x^{-1} \exp \left\{ - \left[\frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z} \right] \frac{u}{4x} \right\} \quad (19)$$

где q – произвольная постоянная поставленной задачи.

При выводе уравнения из уравнения диффузии с учетом коэффициентов дисперсии (уравнение 20):

$$C(x, y, z) = \frac{G}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp \left\{ - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right\} \quad (20)$$

где коэффициенты дисперсии, характеризующие нормальное распределение по осям X и Z (уравнение 21):

$$\sigma_y^2 = \frac{2K_y x}{u}; \quad \sigma_z^2 = \frac{2K_z x}{u} \quad (21)$$

Математическая модель является гауссовой, так как состоит из двух множителей вида (уравнение 22):

$$f(y) = \frac{1}{(2\pi)^2 \sigma_y} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right\} \quad (22)$$

Нормальное распределение выражается кривой, которая имеет форму колокола и меняется при значениях от $-\infty$ до $+\infty$ и с максимумом при $y=0$.

При расчете шлейфа с помощью распределения Гаусса принимаются утверждения:

- весь выброс учитывается (учитываются так же потери газов);
- в виду турбулентности рассеивание подчиняется нормальному распределению по вертикальной оси и по горизонтальной оси, при этом изменение параметров характеризуется функцией от расстояния;
- параметры нормального распределения выводятся экспериментально и описываются приближенными формулами.

Модель на основе нормального распределения принимается как идеальная, так как:

- применяется на ровной поверхности;
- метеорологические условия постоянны;
- плотность газов не должна сильно отличаться от плотности воздуха;
- необходимо наличие ветра со скоростью более 1 м/с.

Поскольку дисперсии высчитываются исходя из экспериментальных данных, воспользуемся формулами расчета для уравнения рассеивания Гаусса. Для будущих расчетов необходимо проведение нескольких измерений для выведения дисперсий потоков. На практике коэффициенты дисперсии аппроксимируются по формулам (23):

$$\sigma_y(x) = ax^b; \quad \sigma_z(x) = cx^d \quad (23)$$

При этом параметры a , b , c , d для расчета имеют табличные значения, которые выведены для условий: среднее время 10 минут, расстояние 100 м, высота 20 м.

В расчетах с данным типом модели возможно внесение поправки для учета рельефа местности. Для этого вводится параметр C_{x_0} , который рассчитывается по формулам (24) и (25):

$$C_{x_0} = (10z_0)^{0,53x^{-0,22}} \quad (24)$$

$$\sigma_z = C_{x_0} \cdot cx^d \quad (25)$$

В этом случае необходимо рассчитать значения параметров c и d для получения корректного значения σ_z .

В модель по нормальному распределению вводится также поправка на среднее время. Так как шлейф выброса в момент времени будет иметь неправильную форму, которую трудно описать с точки зрения математической модели, то используют усреднение за определенный промежуток времени, в течение которого теоретический шлейф примет для расчетов более правильную форму. В этом случае концентрация может быть посчитана наиболее корректно. Данный эффект учитывается при введении поправочного коэффициента $C_{t'}$ при учете времени в секундах (формулы 26,27):

$$C_{t'} = \left(\frac{t'}{600} \right)^{0,2} \quad (26)$$

$$\sigma_y = C_{t'} \cdot ax^b \quad (27)$$

Данный поправочный коэффициент применяется при условии, что значение σ_y имеет значение не меньше, чем значение для скоротечного источника. Поправочный коэффициент во всех расчетах $C_{t'} \leq 0,5$.

Для расчета концентрации загрязняющего вещества от точечного источника, находящегося на высоте H от поверхности земли, уравнение рассеивания принимает следующее выражение, которое включает среднеквадратические отклонения концентраций s_y и s_x (формула 28):

$$C(x, y, z) = \frac{M}{2\pi s_y s_x U} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z - H)^2}{2\sigma_x^2} \right\} \quad (28)$$

Для данного выражение вводятся граничные условия: $z < 0$, то есть $z=0$ – поверхность земли, $x > 0$.

Модель рассеивания для нестационарного источника включает в себя зависимость от времени с момента выброса, что делает расчет более точным с точки зрения оси абсцисс и имеет вид (уравнение 29):

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi^{2/3} \sigma_x \sigma_y \sigma_z)} \cdot \exp \left[-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2} \right] \quad (29)$$

$$\times \exp \left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right]$$

$$\times \left\{ \exp \left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2} \right] \right\}$$

В данном случае параметры $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ увеличиваются с расстоянием $x - x_0$, а скорость, с которой значение увеличивается пропорционально интенсивности турбулентности потока. Для использования данного уравнения параметры выводятся на основе экспериментальных данных.

В ходе преобразования данной модели для использования в качестве прогнозирования места выброса загрязняющих веществ необходимо найти значения констант, удовлетворяющих условиям задачи поиска. В качестве неизвестной по расстоянию до источника является переменная x_0 , а искомой величиной является $x - x_0$.

Для упрощения решения необходимо преобразовать вид уравнения и найти значения констант.

Для расчета по уравнению Гаусса расстояния до предполагаемого источника выброса необходимо воспользоваться формулой расчета максимальной концентрации для нахождения мощности источника (уравнение 30) [3]:

$$C_{max} = \frac{A \cdot Q \cdot F \cdot n \cdot \eta}{H^{4/3}} \cdot \frac{D}{8 \cdot V} \quad (30)$$

где A – климатический коэффициент, зависящий от температурной стратификации атмосферы и определяющий ее рассеивающие свойства при неблагоприятных метеорологических условиях, для среднего Поволжья $A=160$;

Q – мощность источника, г/с;

F – коэффициент, учитывающий скорость оседания загрязняющих веществ в атмосфере (для газообразных загрязняющих веществ $F=1$);

n – безразмерный коэффициент, который учитывает условия выхода газовой смеси из отверстия источника выброса;

η – безразмерный коэффициент, который учитывает влияние рельефа местности на рассеивание примесей;

H – высота точки выброса;

D – диаметр устья источника выброса; V – объем выбрасываемой газовой смеси, м³/с.

Безразмерный коэффициент n рассчитывается при следующих условиях (уравнение 31,32,33):

$$n = 3, \text{ при } V_m \leq 0,3 \quad (31)$$

$$n = 3 - \sqrt{\frac{V_m - 0,3}{4,36 - V_m}}, \text{ при } 0,3 < V_m \leq 2 \quad (32)$$

$$n = 1, \text{ при } V_m > 2 \quad (33)$$

При этом параметр V_m рассчитывается по формуле и учитывает разность минимальной средней температуры в году для региона и температуры конкретного выброса (уравнение 34):

$$V_m = 0,65 \cdot \sqrt[3]{(V \cdot \Delta T)/H} \quad (34)$$

Коэффициент η отражает перепады рельефа и $\eta=1$, при перепадах не более 50 м. Так как для районов г. Тольятти перепады составляют более 50 м, то коэффициент рассчитывается по географическим данным.

Согласно МРР-2017, поправочный коэффициент определяется по формуле (35):

$$\eta = 1 + \varphi_1(\eta_m - 1) \quad (35)$$

где функция φ_1 определяется согласно Приложения №3 к МРР-2017;

функция η_m определяется согласно Приложения №7 к МРР-2017.

Получаем:

$$\eta = 1 + 1,000 \cdot (1,5 - 1) = 1,5$$

По формуле расчета максимальной концентрации для нахождения мощности источника находим выражение для мощности источника (формулы 36, 37):

$$C_{max} = \frac{A \cdot Q \cdot F \cdot n \cdot \eta}{H^{4/3}} \cdot \frac{D}{8 \cdot V} \quad (36)$$

$$Q = \frac{C_{max} \cdot H^{4/3} \cdot 8 \cdot V}{A \cdot F \cdot n \cdot \eta \cdot D} \quad (37)$$

При использовании в расчете известных данных получаем среднюю возможную мощность источника.

Дисперсии σ_x , σ_y , σ_z рассчитываются по формулам (38),(39),(40):

$$\sigma_x = a \cdot x^b \quad (38)$$

$$\sigma_y = c \cdot x^d \quad (39)$$

$$\sigma_z = R \cdot c \cdot x^d, \text{ при } R = (10z)^{0.53x^{-0.22}} \quad (40)$$

Согласно приказу от 2 ноября 2022 г. N 385 «Об утверждении руководства по безопасности «Методика моделирования распространения аварийных выбросов опасных веществ», для описания устойчивости атмосферы используется 6 классов устойчивости по Паскуиллу. Для расчета дисперсий воспользовались табличными значениями расчета (таблица 4). Расчет производится при условиях: среднее время 10 мин, высота менее 20 м. Расчет ведется для расстояний от 10^2 до 10^4 м. Однако, при наличии поправки на время выброса диапазон изменяется: от 10^3 до 10^5 м - и будет являться моделью Лагранжа. Для расчетов выбираем значения, соответствующие атмосфере в области расчета.

Таблица 4 – Параметры расчета дисперсий гауссовского распределения

Устойчивость	Параметры			
	a	b	c	d
Очень нестабильно (А)	0,527	0,865	0,28	0,90
Нестабильно (В)	0,371	0,866	0,23	0,85
Слабонестабильно (С)	0,209	0,897	0,22	0,80
Нейтрально (D)	0,128	0,905	0,20	0,76
Стабильно (Е)	0,098	0,902	0,15	0,73
Очень стабильно (F)	0,065	0,902	0,12	0,67

В качестве концентрации используем полученные значения концентраций загрязняющих веществ из отчета по мониторингу атмосферного

воздуха. Значение скорости и направление ветра фиксируется в момент отбора пробы.

Поскольку основная часть уравнения в нашем расчете является константами, то можем преобразовать уравнение относительно искомой переменной (уравнение 40,41,42).

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi^{2/3}\sigma_x\sigma_y\sigma_z)} \cdot \exp\left[-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2}\right] \quad (40)$$

$$\times \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right]$$

$$\times \left\{ \exp\left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}$$

$$\exp\left[-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2}\right] = \quad (41)$$

$$= \frac{C(x, y, z, t)}{\frac{Q}{(2\pi^{2/3}\sigma_x\sigma_y\sigma_z)} \cdot \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right] \cdot \left\{ \exp\left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}}$$

(42)

$$\exp\left[-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2}\right] =$$

$$= C(x, y, z, t) \cdot \frac{1}{\exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right]}$$

$$\times \frac{1}{\left\{ \exp\left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}} \cdot \frac{2\pi^{2/3}\sigma_x\sigma_y\sigma_z}{Q}$$

Логарифмируем обе части уравнения для упрощения вида (уравнение 43):

$$\begin{aligned}
& \ln\left(\exp\left[-\frac{((x-x_0)-ut)^2}{2\sigma_x^2}\right]\right) = \tag{43} \\
& = \ln(C(x,y,z,t)) \cdot \frac{1}{\exp\left[-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right]} \\
& \times \frac{1}{\left\{\exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right]\right\}} \cdot \frac{2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z}{Q}
\end{aligned}$$

По логарифмическим тождествам и после преобразований получаем (уравнение 44,45,46,47):

$$\begin{aligned}
& -\frac{((x-x_0)-ut)^2}{2\sigma_x^2} \tag{44} \\
& = \ln C(x,y,z,t) + \ln\left(\frac{2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z}{Q}\right) \\
& + \ln\left(\frac{1}{\exp\left[-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right]}\right) \\
& + \ln\left(\frac{1}{\left\{\exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right]\right\}}\right)
\end{aligned}$$

$$-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2} \quad (45)$$

$$= \ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{\left(2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z\right)} \right) \\ - \ln \left(\exp \left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right] \right) - \ln \left(\exp \left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} \right] \right) \\ + \exp \left[-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2} \right]$$

$$-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2} \quad (46)$$

$$= \ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{\left(2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z\right)} \right) - \left(-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right) \\ - \ln \left(\exp \left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} \right] \right) - \ln \left(1 + \frac{\exp \left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} \right]}{\exp \left[-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2} \right]} \right)$$

$$-\frac{((x - x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2} \quad (47)$$

$$= \ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{\left(2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z\right)} \right) + \frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} \\ + \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\left[-\frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} \right] - \left[-\frac{(z + H)^2}{2\sigma_z^2} \right] \right) \right)$$

Преобразуем:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} \right] - \left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2} \right] &= \frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2} - \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} = \frac{(z+H)^2 - (z-H)^2}{2\sigma_z^2} \\ &= \frac{z^2 + 2 \cdot z \cdot H + H^2 - z^2 + 2 \cdot z \cdot H - H^2}{2\sigma_z^2} = \frac{4 \cdot z \cdot H}{2\sigma_z^2} = \frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{((x-x_0) - ut)^2}{2\sigma_x^2} \\ &= \ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{\left(2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z\right)} \right) + \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} \\ & - \ln \left(1 + \exp\left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2}\right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & ((x-x_0) - ut)^2 \\ &= -2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{\left(2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z\right)} \right) + \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right. \\ & \left. + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp\left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2}\right) \right) \right) \end{aligned}$$

$$x - x_0 = \Delta x$$

$$y - y_0 = \Delta y$$

$$\Delta x^2 - 2 \cdot \Delta x \cdot u \cdot t + u^2 \cdot t^2$$

$$\begin{aligned} &= -2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{\left(2\pi^{\frac{2}{3}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z\right)} \right) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} \right. \\ & \left. + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp\left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2}\right) \right) \right) \end{aligned}$$

Преобразовываем и приравниваем к 0:

$$\begin{aligned} & \Delta x^2 - 2 \cdot \Delta x \cdot u \cdot t \\ & + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{\left(2\pi^{\frac{2}{3}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z \right)} \right) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} \right. \\ & \left. - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right) + u^2 \cdot t^2 = 0 \end{aligned}$$

В общем виде получено квадратное уравнение $ax^2+bx+c=0$ по переменной Δx . Для вычисления корней пользуемся формулами дискриминанта и корней (уравнение 48,49):

$$D = b^2 - 4ac \quad (48)$$

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a} \quad (49)$$

То есть можем записать в виде:

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Преобразуем с полученным уравнением:

$$\Delta x_{1,2} =$$

$$= \frac{-(-2 \cdot u \cdot t) \pm \sqrt{(-2 \cdot u \cdot t)^2 - 4 \cdot 1 \cdot + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{(2\pi^{\frac{2}{3}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z)} \right) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right) + u^2 \cdot t^2}}{2 \cdot 1}$$

$$\Delta x_{1,2} = \frac{2 \cdot u \cdot t \pm \sqrt{4 \cdot u^2 \cdot t^2 - 4 + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln \left(\frac{Q}{(2\pi^{\frac{2}{3}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z)} \right) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right) + u^2 \cdot t^2}}{2}$$

$$\Delta x_{1,2} = \frac{2 \cdot u \cdot t \pm \sqrt{5 \cdot u^2 \cdot t^2 - 4 + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln Q + \ln(2\pi^{\frac{2}{3}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right)}}{2}$$

$$\Delta x_{1,2} = u \cdot t \pm \frac{\sqrt{5 \cdot u^2 \cdot t^2 - 4 + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln Q + \ln(2\pi^{\frac{2}{3}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right)}}{2}$$

В условиях уравнения по поиску расстояния до источника выброса невозможно взять решение уравнения как корень с вычитанием корня из дискриминанта, поскольку в данном случае мы получим отрицательное значение, что приведет к неадекватному решению. К примеру, производится замер в точке А и искомое расстояние будет в точке Х, что соответствует решению со сложением, тогда как при вычитании мы получим результат в противоположном расположении против направления ветра как в точке В (рисунок 7).

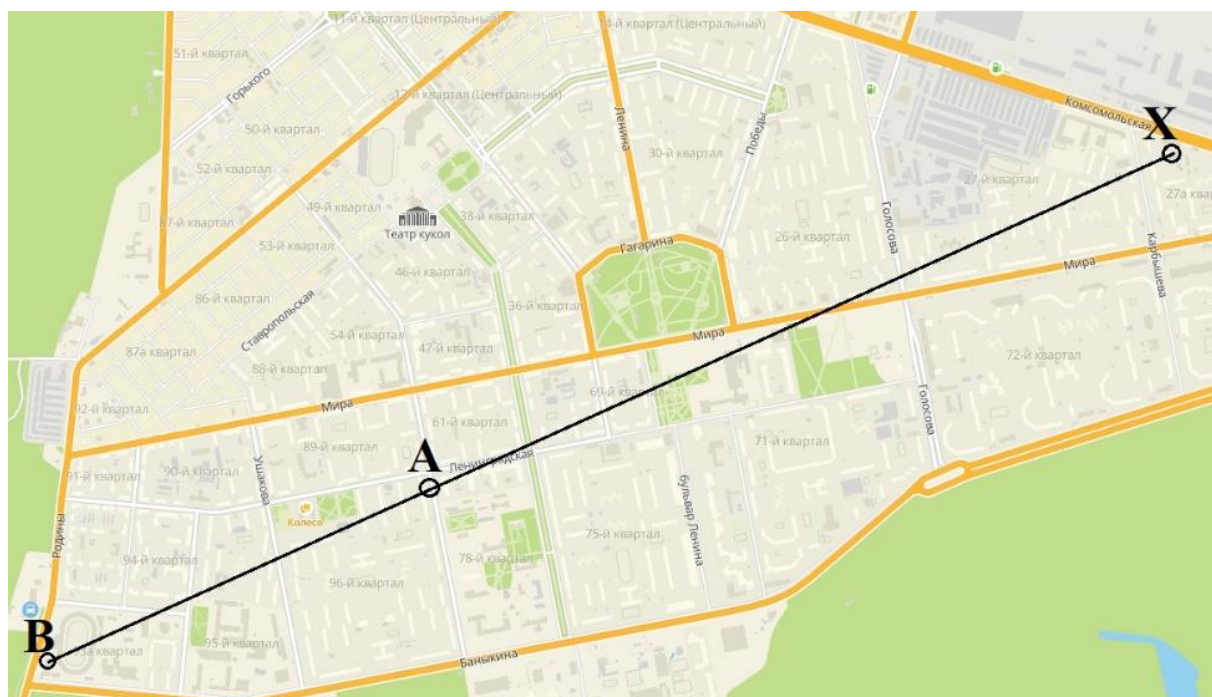


Рисунок 7 – Расположение результата расчета на карте местности

Соответственно, получаем в итоге уравнение:

$$\Delta x = u \cdot t + \sqrt{\frac{5 \cdot u^2 \cdot t^2 - 4 + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln Q + \ln(2\pi^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right)}{2}}$$

В итоге получаем уравнение расстояния до источника выброса газообразных загрязняющих веществ, зависящее от скорости ветра. Время выброса для расчета берется равное 10 мин или 60 мин.

Полученное уравнение оценивается на адекватность с помощью нескольких факторов: нормализованная среднеквадратическая ошибка, коэффициент линейной корреляции и коэффициент F_2 . Для данной оценки необходимо провести серию измерений из одной точки с определением точечного источника, поскольку критерии работают на статистической обработке результатов измерений [29].

Кроме того, необходимо оценить погрешность определения точки выброса, что в данном случае будет представлять собой радиус области нахождения источника. Для решения данной задачи применяем горизонтальную дисперсию, которую рассчитываем по уравнению для минимума граничных условий переменной x :

$$\sigma_x \in [10000; 100000]$$

$$\sigma_x = a \cdot 10000^b$$

В соответствии с выражениями погрешность определения расстояния от точки взятия пробы до предполагаемого источника будет зависеть от класса устойчивости атмосферы в момент забора пробы.

2.2.2. Применение полученной модели

Поскольку для каждого загрязняющего вещества значения констант будут отличаться, то пример расчета проводим по конкретным веществам. Данная модель направлена на идентификацию промышленных выбросов, поэтому для расчетов используются данные нормативной документации предприятий города Тольятти, в которой указаны необходимые параметры, такие как: диаметр устья, высота трубы, температура газовой смеси выброса и, по возможности, мощность источника или расход газовой смеси.

Расчет по диоксиду серы

Для примера производим расчет для загрязняющему веществу – диоксиду серы. По данным, предоставленным НИЛ-13, в точке «пересечение улиц Матросова и Громовой» произведен отбор и анализ 29.04.2020 [26]. Данные анализа приведены в таблице 5. По данным Гидрометцентра России 29.04.2020 днем было ясно, поэтому выбираем класс Е устойчивости атмосферы. Рассчитываем погрешность в данных условиях:

$$\sigma_x = 0,098 \cdot 10000^{0,902} = 397 \text{ м} \approx 400 \text{ м}$$

Таблица 5 – Результат количественного анализа атмосферного воздуха в точке «пересечение улиц Матросова и Громовой» 29.04.2020.

Определяемые показатели, мг/м ³	Концентрация определяемого компонента, мг/м ³	ПДК м.р., мг/м ³
Дата отбора пробы	29.04.2020	-
Направление и скорость ветра, м/с	С-В, 1,5	-
Температура воздуха, °С	11,9	-
Диоксид серы	0,0025	0,5

По нормативному документу ПАО «Тольяттиазот», содержащего перечень мероприятий по охране окружающей среды, находим данные для расчета (таблица 6) [2]. Так как на территории завода расположены несколько источников загрязняющего вещества, необходимо проводить расчет для каждого из них. Для примера расчет произведен для двух источников.

Таблица 6 – Параметры источника выброса на ПАО «Тольяттиазот»

Диоксид серы		
1	2	3
Источник №1	Диаметр устья, м	0,50000
	Высота источника, м	16,4
	Объем ГВС, м ³ /с	1,00138
	Выброс, г/с	0,0260496
	Скорость ГВС, м/с	5,10000
	Температура ГВС, °С	20,0000
Источник №2	Диаметр устья, м	0,20000

Продолжение таблицы 6

1	2	3
	Высота источника, м	10,0
	Объем ГВС, м ³ /с	0,29999
	Выброс, г/с	0,0260001
	Скорость ГВС, м/с	9,54901
	Температура ГВС, °С	20,0000

Для расчетов время принимаем 60 минут, поскольку за данный период времени можно считать погодные условия стабильными и принимать для расчета измеренные данные погодных характеристик.

$$t = 60 \text{ мин} = 3600 \text{ с}$$

Далее подставляем значения в полученную ранее формулу и получаем расстояние до источника от точки замера.

Дисперсии для уравнения рассчитываем при стандартных ограничениях.

$$\sigma_x = 0,098 \cdot 100^{0,902} = 6,24$$

$$\sigma_y = 0,15 \cdot 100^{0,73} = 4,33$$

$$R = (10 \cdot 0,1)^{0,53 \cdot 100^{-0,22}} = 1$$

$$\sigma_z = 1 \cdot 0,15 \cdot 100^{0,73} = 4,33$$

Δx

$$= u \cdot t$$

$$+ \sqrt{\frac{5 \cdot u^2 \cdot t^2 - 4 + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln Q + \ln(2\pi^{\frac{2}{3}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right)}{2}}$$

Для первого источника:

$$\begin{aligned} \Delta x &= 1.5 \cdot 3600 \\ &+ \sqrt{\frac{5 \cdot 1.5^2 \cdot 3600^2 - 4 + 2 \cdot 6,24^2 \left(\ln 0,0025 - \ln 0,0260496 + \ln \left(2 \cdot \pi^{\frac{2}{3}} \cdot 6,24 \cdot 4,33 \cdot 4,33 \right) + \frac{100^2}{2 \cdot 4,33^2} \right) + \frac{(2 - 16,4)^2}{2 \cdot 4,33^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot 2 \cdot 16,4}{4,33^2} \right) \right)}{2}} \\ &= 11440 \pm 400 \text{ м} \\ \Delta x &= 11440 \pm 400 \text{ м} \end{aligned}$$

Для второго источника:

$$\begin{aligned} \Delta x &= 1.5 \cdot 3600 \\ &+ \sqrt{\frac{5 \cdot 1.5^2 \cdot 3600^2 - 4 + 2 \cdot 6,24^2 \left(\ln 0,0025 - \ln 0,0260001 + \ln \left(2 \cdot \pi^{\frac{2}{3}} \cdot 6,24 \cdot 4,33 \cdot 4,33 \right) + \frac{100^2}{2 \cdot 4,33^2} \right) + \frac{(2 - 10)^2}{2 \cdot 4,33^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot 2 \cdot 10}{4,33^2} \right) \right)}{2}} \\ &= 11440 \pm 400 \text{ м} \\ \Delta x &= 11440 \pm 400 \text{ м} \end{aligned}$$

На рисунке 8 представлен результат в виде визуализации на карте. На карте при проведении прямой против направления ветра получаем примерную область, на которой расположен предполагаемый источник выброса.

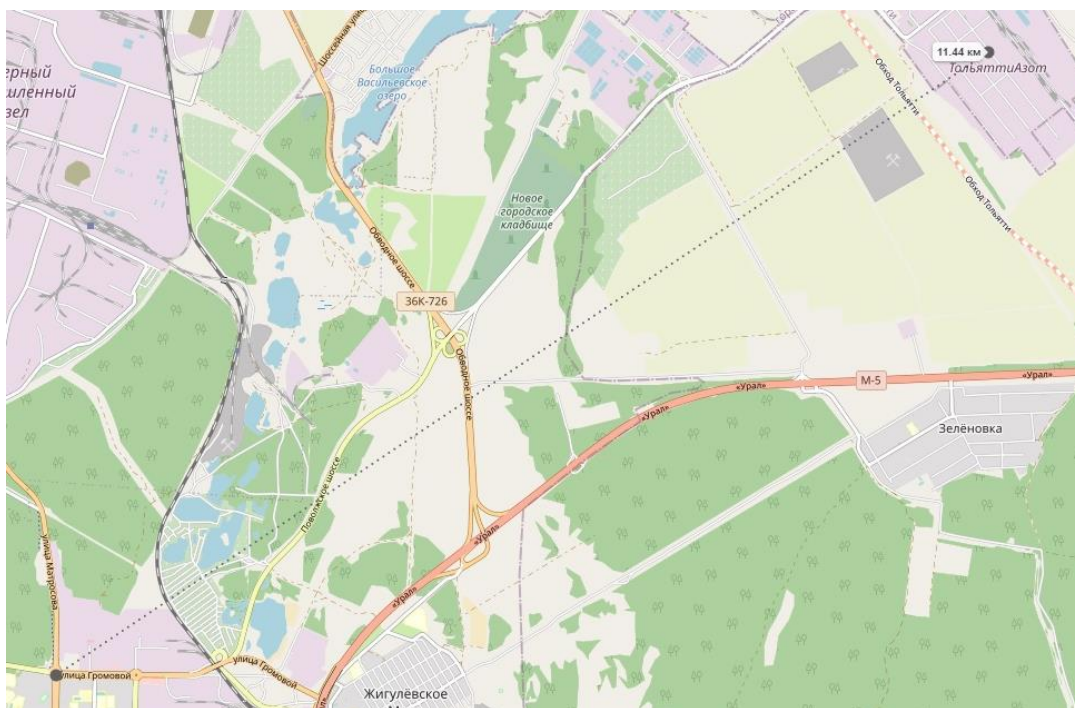


Рисунок 8 – Визуальная интерпретация результата расчета

Также аналогично по данным, предоставленным НИЛ-13, в точке «ул. Л.Толстого, 26а» произведен отбор и анализ 29.05.2020. Данные анализа приведены в таблице 7.

По данным Гидрометцентра России 29.05.2020 днем было облачно, поэтому выбираем класс С устойчивости атмосферы.

Таблица 7 – Результат количественного анализа атмосферного воздуха в точке «ул. Л.Толстого, 26а».

Определяемые показатели, мг/м ³	Концентрация определяемого компонента, мг/м ³	ПДК м.р., мг/м ³
Дата отбора пробы	29.05.2020	-
Направление и скорость ветра, м/с	С-В, 4,0	-
Температура воздуха, °С	24,5	-
Диоксид серы	0,0089	0,5

Рассчитываем погрешность в данных условиях:

$$\sigma_x = 0,209 \cdot 10000^{0,897} = 809 \text{ м}$$

По нормативному документу ПАО «Куйбышевозот», содержащего перечень мероприятий по охране окружающей среды, находим данные для расчета (таблица 8). Так как на территории завода расположены несколько источников загрязняющего вещества, необходимо проводить расчет для каждого из них. Для примера расчет произведен для трех источников.

Таблица 8 – Параметры источника выброса на ПАО «Куйбышевозот»

Диоксид серы		
Источник №1	Диаметр устья, м	0,40000
	Высота источника, м	11,5
	Объем ГВС, м ³ /с	0,39961
	Выброс, г/с	0,0001000

Для расчетов время принимаем 10 минут, поскольку за данный период времени можно считать погодные условия стабильными в условиях непогоды и стабильности атмосферы С.

$$t = 10 \text{ мин} = 600 \text{ с}$$

Далее подставляем значения в полученную ранее формулу и получаем расстояние до источника от точки замера.

Дисперсии для уравнения рассчитываем при стандартных ограничениях.

$$\sigma_x = 0,209 \cdot 100^{0,897} = 13,01$$

$$\sigma_y = 0,22 \cdot 100^{0,80} = 8,76$$

$$R = (10 \cdot 0,1)^{0,53 \cdot 100^{-0,22}} = 1$$

$$\sigma_z = 1 \cdot 0,15 \cdot 100^{0,80} = 8,76$$

$$\Delta x = u \cdot t + \sqrt{\frac{5 \cdot u^2 \cdot t^2 - 4 + 2\sigma_x^2 \left(\ln C(x, y, z, t) - \ln Q + \ln(2\pi^{\frac{2}{3}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z) + \frac{\Delta y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{(z - H)^2}{2\sigma_z^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot z \cdot H}{\sigma_z^2} \right) \right) \right)}{2}}$$

$$\Delta x = 4,0 \cdot 600$$

$$+ \sqrt{\frac{5 \cdot 4,0^2 \cdot 600^2 - 4 + 2 \cdot 13,01^2 \left(\ln 0,0086 - \ln 0,0001000 + \ln \left(2 \cdot \pi^{\frac{2}{3}} \cdot 13,01 \cdot 8,76 \cdot 8,76 \right) + \frac{100^2}{2 \cdot 8,76^2} + \frac{(2 - 11,5)^2}{2 \cdot 8,76^2} - \ln \left(1 + \exp \left(\frac{2 \cdot 2 \cdot 11,5}{8,76^2} \right) \right) \right)}{2}}$$

$$= 5085 \pm 809 \text{ м}$$

$$\Delta x = 5085 \pm 809 \text{ м}$$

На рисунке 9 представлен результат в виде визуализации на карте. На карте при проведении прямой против направления ветра получаем примерную область, на которой расположен предполагаемый источник выброса.

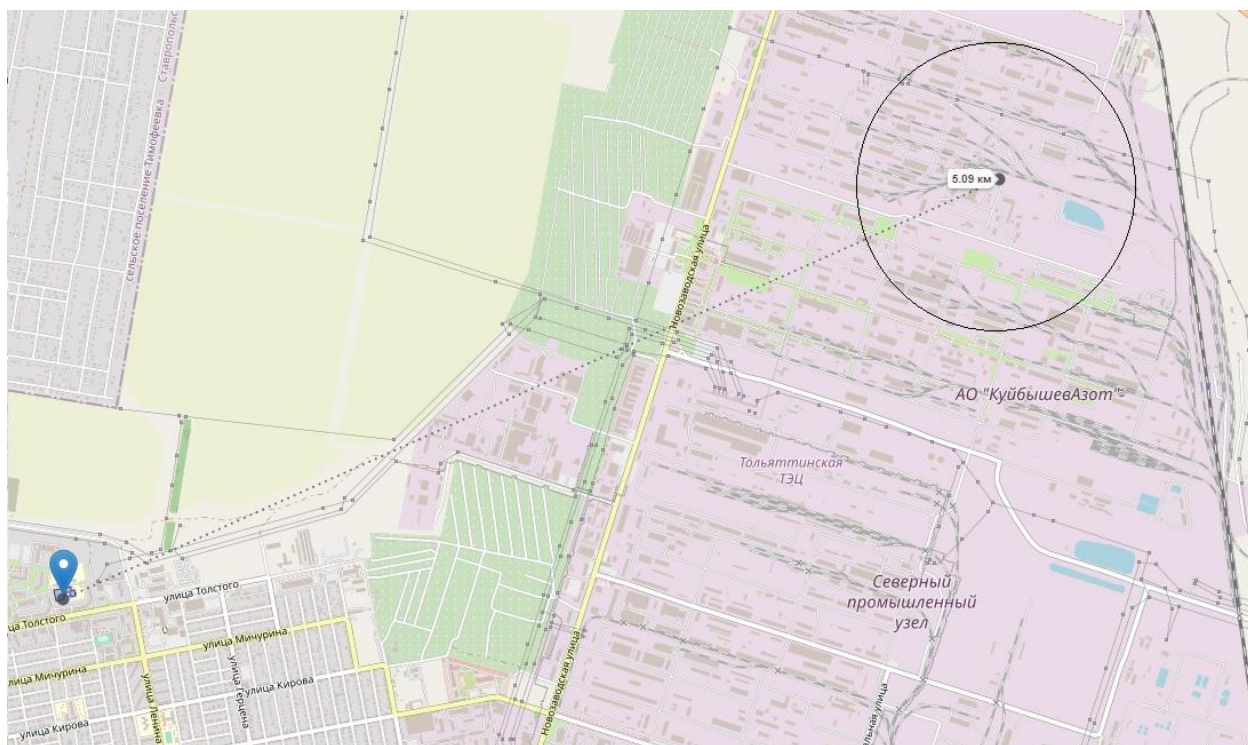


Рисунок 9 – Визуальная интерпретация результата расчета

2.2.3. Алгоритм расчета

На основе предложенного уравнения возможно создать ПО, которое может с помощью модели автоматически вести расчеты и представлять результат как в виде отчета, так и в виде визуализации на карте местности.

Первоначально для создания программного обеспечения по прогнозированию источника выброса необходимо создать базу данных, которая будет включать в себя официальные данные по мероприятиям по охране окружающей среды от предприятий. Данные в настоящее время предоставляются контролирующим органам и все необходимые характеристики указаны в документации. Для создания базы данных необходимо будет интегрировать все отчеты в электронный вид, что может быть достаточно трудозатратным, поскольку документы предоставляются в виде подписанных сканированных документов или в не копируемом формате [4].

Далее необходима точная фиксация метеоусловий во время проведения измерения. Так как расчет аппроксимирует поток загрязняющих веществ, то направление ветра необходимо фиксировать более точно, к примеру, для этого используется комбинированный датчик скорости и направления ветра. Измерение направления ветра такой прибор производит в градусах.

После фиксации метеоданных, забора образца и получения результата количественного анализа производится ввод исходных данных в ПО. Благодаря базе данных время сокращается, поскольку предположительно алгоритм ПО может подобрать необходимые данные исходя из направления.

По результатам расчета можно оценить предполагаемое местоположение источника выброса с учетом погрешности дисперсии.

ПО в перспективе представляет данные в виде нанесенных векторов на карте города, центром которых является точка забора пробы, а в конце вектора обозначается область, радиус которой соответствует погрешности.

Предполагаемый алгоритм расчета представлен на рисунке 10.

Данной задаче так же можно обучить нейросеть, которая в свою очередь сможет анализировать данные и представлять далее прогнозы с учетом накопленных данных о погодных условиях, местности и типах выбросов загрязняющих веществ. По сути ПО или далее нейросеть смогут анализировать изначально исходя из входных параметров примерное местонахождение источника и производить расчеты по полученным данным анализов в ближайшей точке. Для полной автоматизации системы для контроля за качеством воздуха возможна установка стационарных анализаторов, которые смогут передавать полученные данные в базу, из которой уже ПО или нейросеть смогут брать для расчета. В настоящее время такие расчеты трудозатратные, поскольку требуется рассчитать не один источник, а десятки на одном направлении в одном предприятии. Кроме того, автоматизация данной функции предоставит возможность распознавания содержания в воздухе опасных веществ в концентрациях, превышающих ПДК.



Рисунок 10 – Алгоритм работы ПО

В этом случае своевременные уведомления смогут получить: руководители предполагаемого источника выброса, контролирующие органы и жители. Результаты работы ПО могут быть интегрированы как на сайт, интернет-рассылку или приложение, так и в популярные мессенджеры.

Выводы по разделу.

Во второй части работы проведен анализ загрязняющих веществ г.о. Тольятти. В результате чего сделан вывод о том, что основными загрязняющими веществами для г.о. Тольятти являются: ацетон, бензол, бутилацетат, стирол, метилстиролы, метилакрилат, бензальдегид, фенол, толуол, ксилолы, алкилбензолы, нафталин, бензойную кислоту, ацетофенон, бензофенон, хлороформ, трихлорэтилен, четыреххлористый углерод, пиридин, фталевая кислота. Данный перечень загрязняющих веществ относится к промышленным выбросам, а также к компонентам от автомобильного топлива и продуктов его сгорания. Кроме перечисленных соединений в воздухе обнаружены кислородсодержащие соединения: бутанол, октанол, карбоновые кислоты, альдегиды C5-12. Данные вещества могут возникать в процессе гниения бытовых отходов. Кроме того, данный процесс в основном происходит под действием бактерий, которые преобразуют органические соединения в метан и углерода диоксид. Кроме того, в воздухе обнаружено содержание аммиака, серы диоксида и капролактама, что свидетельствует о выбросах производств г.о. Тольятти.

Далее приведено математическое преобразование уравнения рассеивания на основе распределения Гаусса. Для преобразования за основу взято уравнение распределения Гаусса, работающее в модели RAPTAD и DEGADIS. В основе лежит уравнение рассеивания Гаусса для нестационарного источника, поскольку нас интересует определение неизвестного расстояния до источника выброса, и Лагранжева модель рассеивания. Комплексная модель позволяет прогнозировать рассеивание в местности со сложным рельефом. Ограничения для данной модели были выставлены по расстоянию до 100 км и по отсутствию штиля, то есть должна быть учтена скорость ветра для расчетов. В итоге получили уравнение расстояния до источника выброса газообразных загрязняющих веществ, зависящее от скорости ветра.

В соответствии с выражениями погрешность определения расстояния от точки взятия пробы до предполагаемого источника будет зависеть от класса устойчивости атмосферы в момент забора пробы.

Поскольку для каждого загрязняющего вещества значения констант будут отличаться, то пример расчета привели по одному веществу – диоксиду серы. Данная модель направлена на идентификацию промышленных выбросов, поэтому для расчетов использовались данные нормативной документации предприятий города Тольятти, в которой указаны необходимые параметры. Рассчитано расстояние до источников от точки забора пробы с учетом всех данных при заборе пробы и параметров источника. В результате получено численное значение с учетом абсолютной погрешности расчета и визуальная интерпретация результата расчета.

Полученную модель можно применить для прогнозирования источника выброса загрязняющего вещества. С учетом всех начальных параметров данная модель может быть автоматизирована посредством написания алгоритма для ПО и также использована для нейросети, которая далее может очертить примерную область возникновения выброса.

Заключение

В ходе литературного обзора рассмотрены методы расчета рассеивания загрязняющих веществ. В настоящее время разработано несколько моделей с различными ограничениями, так как одни и те же функции для одного и того же типа источника могут отличаться в зависимости от типа устойчивости атмосферы и скорости ветра. Пришли к выводу, что наиболее применяемым уравнением является уравнение рассеивания Гаусса, поскольку уравнение дает описание нормальному распределению функции в трех плоскостях и является более универсальным и удобным в применении.

При рассмотрении моделей распространения загрязняющих веществ в атмосфере проведен обзор некоторых моделей, использующих основные методы расчета. Наиболее полезными являются модели RAPTAD и DEGADIS, так как они используют в качестве основного уравнения гауссовское распределение и имеют ограничения в использовании до 100 км, что достаточно подходит для цели исследования.

В исследовании проведен анализ загрязняющих веществ г.о. Тольятти. В результате чего сделан вывод о том, что основными загрязняющими веществами для г.о. Тольятти являются: ацетон, бензол, бутилацетат, стирол, метилстиролы, метилакрилат, бензальдегид, фенол и другие вещества. Данный перечень загрязняющих веществ относится к промышленным выбросам, а также к компонентам от автомобильного топлива и продуктов его сгорания. Кроме того, в воздухе обнаружено содержание аммиака, серы диоксида и капролактама, что свидетельствует о выбросах производств г.о. Тольятти.

Приведено математическое преобразование уравнения рассеивания на основе распределения Гаусса. В основе модели лежит уравнение рассеивания Гаусса для нестационарного источника, поскольку необходимо определение неизвестного расстояния до источника выброса, и Лагранжева модель рассеивания. Комплексная модель позволяет прогнозировать рассеивание в местности со сложным рельефом. Ограничения для данной модели были

выставлены по расстоянию до 100 км и по отсутствию штиля, то есть должна быть учтена скорость ветра для расчетов. В итоге получено уравнение расстояния до источника выброса газообразных загрязняющих веществ, которое было применено для расчета двух примеров рассеивания серы диоксида с числовой и визуальной интерпретацией.

Сделан вывод о том, что полученную модель можно применить для прогнозирования источника выброса загрязняющего вещества. С учетом всех начальных параметров данная модель может быть автоматизирована посредством написания алгоритма для ПО и также использована для нейросети, которая далее может очертить примерную область возникновения выброса. Приведен примерный алгоритм действия ПО для реализации поставленной задачи.

Данное решение является достаточно актуальным, поскольку в настоящее время развитие отраслей направлено в сторону автоматизации и цифровизации процессов. Автоматизация и создание базы данных с расчетом источника выброса позволит увеличить контроль за состоянием атмосферного воздуха г.о. Тольятти в сфере контроля промышленных выбросов.

Список используемой литературы

1. . Абдула Ж. Моделирование распространение вещества в нижнем слое атмосферы // Ecological Technologies. 2016. С. 174–176.
2. Антропов К. М. Методология описания загрязнения атмосферного воздуха екатеринбурга диоксидом азота методом land use regression // Гигиена и санитария. 2013. С. 102–105.
3. Базарский О. В. Математическая модель загрязнения при поверхностных отложений аэрозольными частицами // Инженерные изыскания. 2015.
4. Барикаева Н. С. Совершенствование системы мониторинга загрязнения воздуха придорожных территорий городов мелкодисперсной пылью 2017.
5. Богомолов С. А. Совершенствование оценки пылевого загрязнения атмосферы урбанизированных территорий с учетом плотности застройки 2021.
6. Бояршинов М. Г. Математическое моделирование переноса и рассеяния газообразных примесей в растительных массивах 2018.
7. Голованов А. А. Комплексное определение состава атмосферного воздуха в городском округе Тольятти. 2020.
8. Запасная Л. А. Сравнительный анализ моделей прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха источниками выбросов опасных химических веществ // Успехи в химии и химической технологии. 2011. № 117 (1). С. 43–47.
9. Кирсанов Ю. Г. Оценка воздействия выбросов вредных веществ на атмосферный воздух : учебное пособие / Ю. Г. Кирсанов,.
10. Менин Б. М. Фундаментальные константы: оценка погрешности измерений / Б. М. Менин, 2019.
11. Олишевский А. Т. Обзор методических подходов к моделированию загрязнения атмосферы промышленными объектами на примере США, стран ЕС и России 2022.С. 46–51.

12. Орлов С. А. Математическое моделирование процессов аэродинамики в лесных массивах и насаждениях 2012.
13. Тольяттиазот П. Перечень мероприятий по охране окружающей среды // 2019.
14. Трембицкий А. В. Приказ «Об утверждении руководства по безопасности „Методика моделирования распространения аварийных выбросов опасных веществ“» 2022.
15. Шепелев В. Д. От автотранспорта на основе нейросетевых алгоритмов a neural-network-algorithms-based model for assessing the quantity and concentration of fine emissions of harmful substances from road TRANSPORT 2022. № 4 (16). С. 186–196.
16. Агенство по атомной энергии Рассеяние радиоактивных материалов в воздухе и воде и учет распределения населения при оценке площадки для АЭС. 2017.
17. Янов А. Ю. О задачах диффузии загрязняющих веществ в атмосфере // Технические науки – от теории к практике. 2013. (18).
 - a. Benson P. Development and Verification of the California Line Source Dispersion Model // Transportation research record. 2005. С. 69–77.
18. Essa K. S. M., El-otaify M. S. Mathematical Model for Atmospheric Dispersion Equation (a Review) // J. Rad. Nucl. Appl. 2021. № 2 (128). С. 119–128.
19. Fabbri L. Global sensitivity analysis of the ADAM dispersion module: Jack Rabbit II test case // Atmospheric Environment. 2020. С. 117586.
20. Holmes N. S., Morawska L. Ā. A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles : An overview of different dispersion models available 2006. № 2 (40). С. 5902–5928.
21. Johnson J. B. An Introduction to Atmospheric Pollutant Dispersion // Environmental sciences proceedings. 2022.
22. Liu T. Control of flow , thermal and pollutant concentration fields by entrainer air streams to improve fresh air quality intake into a semiconductor manufacture / processing plant // International Journal of Thermofluids journal. 2022.

№ July (16).

23. Maruntalu O. Mathematical model for air pollutants // U.P.B. Sci. Bull., Series D. 2015. № April.

24. Mas Hatano P. E. CALINE4 - A dispersion model for predicting air pollutant concentrations near roadways. 1989.

25. Perry S. G. Characterization of pollutant dispersion near elongated buildings based on wind tunnel simulations // Atmospheric Environment. 2016. (142). C. 286–295.

26. Pokhrel R., Lee H. Comparison of Gaussian Plume Model and Lagrangian Particle Model for the Application of Coastal Air Quality Modelling // American Journal of Environmental and Resource Economics. 2019. № 4 (4). C. 152–158.

27. Pospelov B. Mathematical model of determining a risk to the human health along with the detection of hazardous states of urban atmosphere pollution based on measuring the current // Ecology. 2020. C. 37–44.

28. Sabri A. A. Mathematical model for the study effects of meteorological conditions on dispersion of pollutants in air // Diyala Journal of engineering sciences. 2011. № 02 (04). C. 150–165.

29. Science E. Distributive Model of Maximum Permissible Emissions of Enterprises into the Atmosphere and Its Application Distributive Model of Maximum Permissible Emissions of Enterprises into the Atmosphere and Its Application // Earth and Environmental Science PAPER. 2019.

30. Science E. Assessment of the AERMOD dispersion model in complex terrain with different types of digital elevation data Assessment of the AERMOD dispersion model in complex terrain with different types of digital elevation data // Earth and Environmental Science PAPER. 2021.

31. Section P. A puff pollutant dispersion model with wind shear and dynamic plume rise // Atmospheric Environment. 1978. № 1970 (12). C. 1933–1938.