

М.С. Зароднюк¹, Е.В. Кучменко¹, Е.В. Моложникова²,
И.И. Маринайте², О.Г. Нецветаева^{1,2}

Восстановление полей загрязнения методами рецепторного моделирования на примере пос. Хомутово

¹ Институт систем энергетики им. Мелентьева СО РАН,

² Лимнологический институт СО РАН, г. Иркутск

Поступила в редакцию 27.01.2006 г.

Формализована задача определения источников выбросов и восстановления поля концентраций в локальном масштабе по данным наблюдений (обратная задача). Предложенная постановка предполагает минимизацию квадрата невязки между экспериментальными и расчетными данными с учетом баланса между выбросами загрязняющего вещества за период, его выпадениями на локальной территории и долей, уходящей в дальний перенос. В качестве исходных используются данные наблюдений за химическим составом снежного покрова в промышленных, сельскохозяйственных и фоновых пунктах региона. Проведены наблюдения в контрольном пункте (пос. Хомутово), результаты которых позволили построить поверхность, имитирующую реальное поле выпадений, и аппроксимировать ее аналитической функцией. Установлено, что для такого вида многообразия и нескольких источников выбросов задача нахождения коэффициентов является многоэкстремальной. Численно реализована задача поиска глобального экстремума такой функции. Найдены ее реальные коэффициенты по данным химического анализа выпадений (снежного покрова) в контрольном пункте.

Для городов, имеющих сложный рельеф и развинутую систему местной циркуляции, например расположенных на побережье оз. Байкал, достоверную картину распространения загрязняющих веществ можно получить только путем создания оригинальной трехмерной модели циркуляции для каждого города или поселка. При этом дополнительные осложнения вносит отсутствие градиентных наблюдений на большом расстоянии гидрометеорологических станций и достоверной информации о степени устойчивости атмосферы и интенсивности турбулентного обмена. Кроме того, для Байкальской природной территории большое значение имеет оценка вклада локальных и региональных источников загрязнения, а также естественных и антропогенных факторов. В этих условиях возникает настоятельная необходимость решения обратной задачи — восстановления полей загрязнения снежного покрова и приземного слоя воздуха, создаваемых отдельными источниками выбросов, по данным химического анализа проб снега.

Выбранный способ идентификации источников загрязнения — экспериментальный анализ выпадений, при котором вклады отдельных источников выявляются по соотношению концентраций заданного набора соединений с учетом имеющейся информации о координатах и мощности источников выбросов [1, 2]. В англоязычной литературе этот подход обозначается термином «рецепторное моделирование».

Анализ снежного покрова дает общую характеристику выпадений за период с ноября по март [3]. Получающиеся в результате статистической обработки пространственные закономерности можно назы-

вать функциями распределения. Традиционно в построении такого рода связей принято опираться на нормальный закон, который в одномерном случае при $x \geq 0$ описывается формулой

$$f(x) = a \exp[-s(x - R)^2], \quad (1)$$

где a — максимальное значение функции; R — расстояние до точки максимального выпадения; s — коэффициент, обратный интенсивности выпадений. На рис. 1 изображены функции распределения от двух разных стационарных источников.

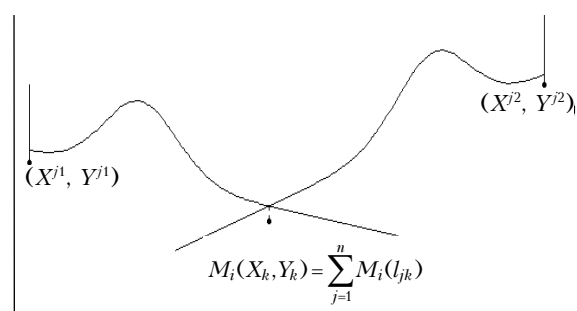


Рис. 1. Экспоненциальные функции распределения, характеризующие мгновенное воздействие двух источников выбросов

Фактически, для определения суммарного выпадения i -го вещества в некоторой точке местности необходимо сложить значения выпадений этого вещества, формирующихся под влиянием выбросов каждого отдельного источника.

Однако при описании поля выпадений за достаточно продолжительный период необходимо учесть, что f зависит не только от x — расстояния от источника до точки, но и от угла направления источник—рецептор. Если в случае небольшого интервала времени (20–30 мин) направление ветра можно считать постоянным, то ось OX можно направить параллельно ветру. При этом максимум поля загрязнения будет находиться на этой оси на расстоянии R . В направлении, перпендикулярном OX , снижение концентрации (или выпадения) загрязняющего вещества можно также описать нормальным законом. В течение периода, равного нескольким месяцам, направление ветра, очевидно, нельзя считать постоянным.

Необходимо отметить следующие свойства, характерные для многообразия, описывающего реальное поле выпадений от одиночного источника выбросов. Во-первых, точка, соответствующая координатам источника, — стационарная, соответствует минимуму функции распределения, причем функция в этой точке имеет нулевое значение. Во-вторых, если расстояние между источником и рецептором стремится к бесконечности, значения функции также стремятся к нулю. В-третьих, по данным наблюдений, функция имеет два локальных максимума на наиболее повторяющихся, почти смежных направлениях от источника. Наконец, она должна в какой-то части суперпозиции соответствовать нормальному закону распределения, что не противоречит второму и третьему свойствам.

С учетом наблюдаемых вышеперечисленных особенностей в качестве распределения i -го компонента от j -го источника предлагается функция

$$F_i(X, Y) = \left[A_i((X^j - X) \cos \varphi - (Y^j - Y) \sin \varphi)^2 + B_i((X^j - X) \sin \varphi + (Y^j - Y) \cos \varphi)^2 \right] \times \exp \left[-s_i(\sqrt{(X^j - X_i)^2 + (Y^j - Y_i)^2} - R_i)^2 \right], \quad (2)$$

где A_i/B_i — коэффициент преобладания направлений; (X_i, Y_i) — координаты их отклонения от смежности; φ — угол направления ветра. На рис. 2 изображена поверхность функции распределения выпадения примеси от одного источника для юга Восточной Сибири. Распределение одного компонента от всех источников представляет сумма функций вида (2) по всем $j = \overline{1, n}$.

Существует линейная зависимость между выброшенным за период химическим веществом, его локальным выпадением и долей, попадающей в дальний перенос [2]. С математической точки зрения такие соотношения задают систему линейных уравнений:

$$M_i(X_k, Y_k) = \sum_{i=1}^m Q_{ij} x_{jk} + \sum_{i=1}^m G_i - \sum_{i=1}^m Q_{ij} P_j, \quad (3)$$

где $M_i(X_k, Y_k)$ — масса i -го вещества в k -й точке замера; Q_{ij} — выброс i -го вещества j -м источником; x_{jk} — вклад этого источника в k -й точке замера, $k = \overline{1, r}$; P_j — доля выброса j -го источника, уходящая в дальний перенос за пределы территории населенного пункта; G_i — вклад фонового загрязнения атмосферы в выпадение в точке-рецепторе для i -го вещества.

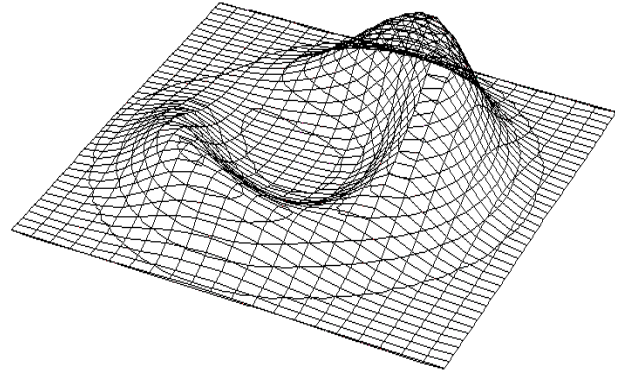


Рис. 2. Поверхность функции распределения поллютанта в снежном покрове, характерная для юга Восточной Сибири

Для поиска параметров функции распределения по данным наблюдений необходимо решить следующую задачу. Найти

$$\sum_{k=1}^r \left(\sum_{i=1}^m M_i(X_k, Y_k) - m \sum_{j=1}^n F(\alpha_j, X_k, Y_k) \right)^2 \rightarrow \min_{\alpha} \quad (4)$$

при ограничениях:

$$a_{ij} > 0, s_{ij} > 0 \text{ и } R_{ij} > 0, \\ 0 < R_{ij} < X^j - Y_i, 0 < R_{ij} < Y^j - Y_i, \quad (5)$$

где $\alpha_j = (A_j, B_j, \varphi, s_j, X_j, Y_j, R_j)$.

Чтобы уменьшить размерность задачи, необходимо исследовать зависимость параметров функции от технологических характеристик, таких как высота источников, температура и интенсивность выбросов, а также от метеорологических и географических показателей, которые в некоторых случаях можно считать одинаковыми для всех источников в населенном пункте. Тогда с малыми потерями точности можно реализовать постановку (4) на большое количество источников.

В рамках постановки задачи идентификации источников выбросов этап определения параметров функций распределения, вообще говоря, не является ключевым. Существует возможность одновременного вычисления влияний источников на содержание поллютантов в точках-рецепторах и параметров функции распределения. С учетом предпосылки об одинаковом рассеивании легких примесей имеем

$$\sum_{k=1}^r \left[\sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^m Q_{ij} x_{jk} - \sum_{i=1}^m Q_{ij} P_j + \right. \right.$$

$$\left. + \sum_{i=1}^m G_i - mF(\alpha_j, X_k, Y_k) \right] \rightarrow \min_{\alpha, r} \quad (6)$$

с учетом ограничений (3)–(5).

С одной стороны, постановку (3), (5), (6) можно классифицировать как задачу аппроксимации, основанную на методе наименьших квадратов. Поэтому необходимо заботиться о том, чтобы количества точек аппроксимации было больше количества переменных с учетом ограничений-равенств. С другой стороны, предложенную постановку можно рассматривать как задачу глобальной оптимизации, при решении которой численными методами необходимы исследования единственности решения [4].

Для уточнения параметров функции распределения было признано целесообразным произвести отбор проб в контрольном пункте. При выборе контрольного пункта, в качестве которого рассматривается пос. Хомутово, учитывались количество источников выбросов, особенности рельефа и местной циркуляции. Поселок находится на значительном удалении от крупных водных объектов. В дальнейшем считается, что рассеивание примесей от локаль-

ных источников в Хомутово происходит над ровной однородной поверхностью и с удовлетворительной точностью описывается стандартными методиками. Поселок расположен в 30 км к северо-северо-западу от центра г. Иркутска (рис. 3). Согласно наземным и аэрологическим данным повторяемость ветров южного направления достаточно мала (особенно в холодный период года) и поэтому непосредственное влияние г. Иркутска на пос. Хомутово можно исключить.

В поселке основными источниками загрязнения атмосферы являются две отопительные котельные. Их общая установленная мощность составляет 3 Гкал/ч. В котельных пос. Хомутово используется азейский бурый уголь, для отопления домов частного сектора (кирпичные домовые печи) сжигаются дрова и уголь.

В пос. Хомутово 21–22 февраля 2005 г. были проведены снегомерные съемки, в результате которых отобраны 32 пробы снежного покрова. Карта-схема отбора проб представлена на рис. 3. Параллельно производился отбор проб для ионного анализа и для анализа содержания полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). В табл. 1 представлено относительное содержание ПАУ в пробах, нормированное по бенз(а)пирену.

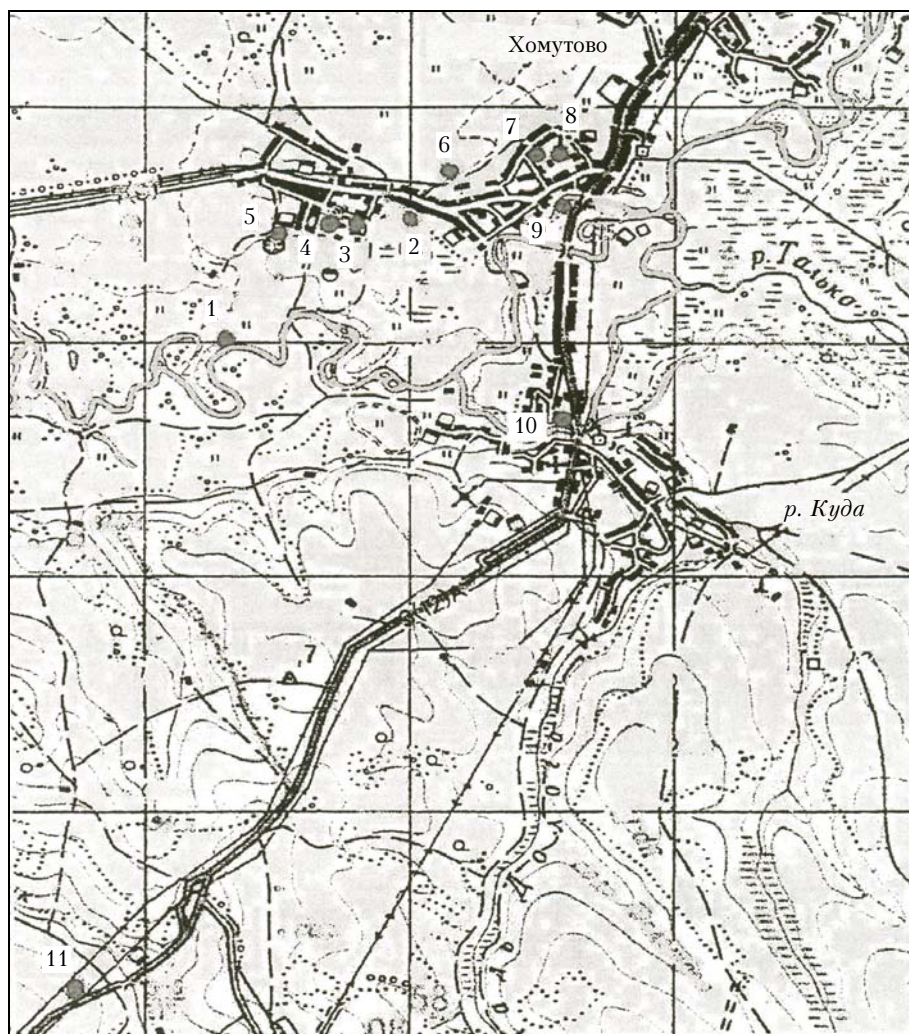


Рис. 3. Схема отбора проб в пос. Хомутово

Относительное содержание ПАУ в выпадениях в Хомутово

№ пробы	Место отбора	Фенантрен	Антрацен	Флуорантен	Пирен	Бенз(а)-антрацен	Хризен	Бенз(б)-флуорантен	Бенз(к)-флуорантен	Бенз(г,х,и)-периллен	Инденопирен
1	Окраина	14,24	0,09	5,72	2,84	0,00	1,73	2,45	1,60	0,00	0,00
2	За болотом	11,26	0,12	2,64	1,67	0,00	0,00	1,36	2,57	5,17	2,99
3	Ворота	32,15	0,00	3,88	1,89	0,00	0,24	1,10	1,90	0,00	0,00
4	Запад	17,96	0,00	3,61	1,34	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
6	Северо-восток	13,77	0,00	6,94	3,91	1,64	2,05	1,64	2,34	2,21	1,70
8	Школа	30,55	0,54	10,52	6,68	3,03	3,84	4,03	4,51	4,82	3,29
9	1-й мост	6,63	0,08	3,31	2,10	0,48	1,34	1,63	1,58	1,76	1,07
10	3-й мост	9,62	0,15	3,37	1,85	0,29	2,19	1,40	1,71	3,91	2,83
11	Дорога в Иркутск	11,98	0,18	5,68	3,04	0,37	2,61	1,85	1,59	2,13	1,33

Как видно из рис. 4 и табл. 1, и по составу, и по соотношению индивидуальных ПАУ в среднем выпадения в пос. Хомутово близки к фоновым и существенно ниже, чем, например, в г. Слюдянке, где насчитывается более 20 теплоисточников.

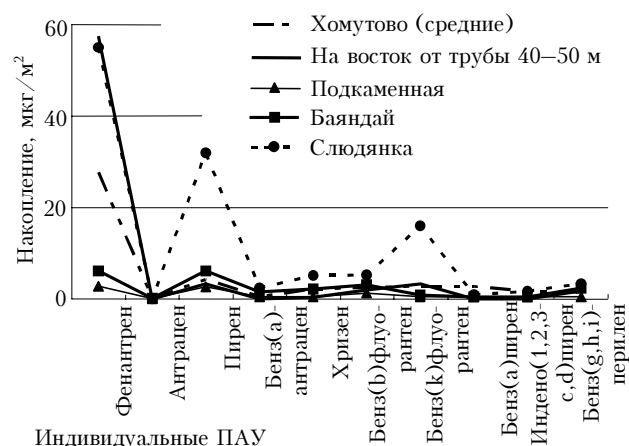


Рис. 4. Состав ПАУ в снежном покрове различных пунктов Приангарья

Тем не менее так же, как и в Слюдянке, заметно увеличение содержания флуорантена и фенантрена, что характерно для снежного покрова в зоне действия

мелких котельных. Значительные превышения над фоновыми значениями выпадений фенантрена и флуорантена отмечаются в точках № 3 (ворота) и № 8 (школа), которые расположены на расстоянии 40–50 м от трубы центральной котельной (№ 3) и примерно в 20 м от школьной котельной (№ 8). Таким образом, исследование концентраций индивидуальных ПАУ позволяет даже методом экспертных оценок уверенно идентифицировать воздействие отдельных локальных теплоисточников на фоне регионального загрязнения, создаваемого крупными промышленными центрами.

Результаты ионного анализа проб, отобранных в пос. Хомутово, представлены в табл. 2.

Как видно из табл. 2, повышенное загрязнение сульфатами наблюдается только в зоне действия центральной котельной к востоку (точка № 3) и в направлении запад-запад-юг (точка № 4).

Факторный анализ, выполненный с использованием стандартного пакета программ STATISTICA 6.0, позволяет выделить четыре фактора — ионы HCO_3^- , SO_4^{2-} , NO_3^- , K^+ , Ca^{2+} , NH_4^+ , Mg^{2+} , по-видимому, характерны для выбросов котельных, так же как фенантрен; Na^+ и Cl^- , похоже, имеют естественную природу; все остальные ПАУ, кроме бенз(а)антрацена, бенз(г,х,и)перилена и инденопирена, характерны для регионального фона с учетом того, что

Таблица 2

Выпадения основных ионов, рассчитанные по результатам химического анализа проб, отобранных в пос. Хомутово, мг/м²

Место отбора	HCO_3^-	SO_4^{2-}	NO_3^-	Cl^-	Na^+	K^+	Ca^{2+}	Mg^{2+}	NH_4^+
Окраина	551,0	332,0	79,1	315,9	178,3	11,0	213,5	27,0	37,0
За болотом	194,8	125,1	43,3	14,8	7,2	2,9	77,9	11,5	14,8
Ворота	1379,7	425,3	134,0	30,2	25,7	32,1	469,8	47,0	30,2
Свалка	895,2	422,9	106,7	11,0	17,1	9,9	354,3	30,5	22,9
Запад	2300,0	582,7	176,3	26,1	21,5	98,1	682,3	75,1	62,9
Север	142,5	125,1	65,2	30,1	9,2	5,1	80,4	13,6	19,6
Северо-восток	38,4	112,5	61,3	10,6	3,4	4,7	50,6	8,8	18,1
Школа	51,3	160,7	76,1	45,2	23,7	6,9	63,1	10,7	30,6
1-й мост	139,3	190,7	64,2	40,7	25,7	8,8	78,8	15,4	23,8
3-й мост	72,9	258,7	140,5	246,3	146,4	14,1	104,1	17,0	44,7
Дорога в Иркутск	0,32	30,0	151,7	59,2	231,0	127,2	13,1	58,9	13,1

Таблица 3

Параметры функции (2) для центральной котельной, полученные численно с использованием реальных данных о выпадениях сульфатов

Параметр	Масштаб	
	глобальный	локальный
A	11485,26	12773,27
B	503,55	535,26
φ	0,5	3,63
s_j	0,64	0,61
X_j	415,46	415,52
Y_j	756,66	756,62
R	0,12	0,102

все пробы отбираются в пределах 100 м от автодорог. Упомянутые выше бенз(а)антрацен, бенз(г, h, i)перилен и инденопирен выделяются в качестве отдельного фактора, возможно, потому, что их концентрации в пробах очень малы и, соответственно, значимость полученных характеристик невелика. Данные наблюдений за выпадениями сульфатов в контрольном пункте позволили определить параметры реальной функции распределения выпадений от еди-

ничного источника выбросов в локальном масштабе (табл. 3).

Полученные результаты позволят в дальнейшем решить задачу идентификации вкладов источников выбросов в предложенной постановке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 05-05-97233р_байкал_а).

1. Кучменко Е.В., Моложникова Е.В., Филитов С.П. Идентификация данных о выбросах объектов теплоэнергетики на основе химического анализа состава осадков // Оптика атмосф. и океана. 2002. Т. 15. № 5–6. С. 541–545.
2. Кучменко Е.В., Моложникова Е.В., Маринайте И.И., Зароднюк М.С. Идентификация источников аэрозолей по соотношению индивидуальных концентраций антропогенных загрязнителей // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 18. № 5–6. С. 497–501.
3. Рапута В.Ф., Коковкин В.В. Методы интерпретации данных мониторинга загрязнения снежного покрова // Химия в интересах устойчивого развития. 2002. № 10. С. 669–682.
4. Васильев О.В. Лекции по методам оптимизации. Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1994. 344 с.

M.S. Zarodnuk, E.V. Kuchmenko, E.V. Molozhnikova, I.I. Marinayte, O.G. Netsvetaeva. Restoration of pollution fields by receptor modeling methods near Khomutovo settlement as an example.

The problem of detecting emission sources and restoring the field of concentrations on a local scale was formalized using the data of observations (the inverse problem). The suggested statement supposes minimization of a squared discrepancy between the experimental and calculated data taking into account the balance between the pollutant emissions over the period of its deposition on a local territory and the part that is transported over long distances. The data of observations on chemical composition of the snow cover in industrial, agricultural and background points of the region are used as initial data. The observations were made at the checkpoint (Khomutovo settlement). The results allowed a surface, simulating the real field of deposition, to be constructed and approximated by analytical function. It was established that for such a type of the function and several sources of emissions the problem of calculating the coefficients is multi-extreme. The problem of search for a global extremum of this function was implemented numerically. Its real coefficients were calculated using the data on chemical analysis of the deposition (snow cover) at the checkpoint.