

Построение информационной модели расчета распространения примеси в приземном слое атмосферы над территориально-распределенными объектами

Павлий В.А.

Донецкий национальный технический университет,

pavliy@cs.dgtu.donetsk.ua

Abstract

Pavliy V. "Development of an information model for pollutants' distribution estimation in atmosphere bottom layer above territorially-distributed objects" An analysis of existing methods and software for pollutants' distribution estimation in atmosphere bottom layer is carried out. An information model for pollutants' distribution estimation in atmosphere bottom layer above territorially - distributed objects on real data obtained by ecological monitoring subjects is offered.

Keywords: Information model, air pollution, common diffusion equation, pollutants concentration short-term prediction, fields concentration restoring, expert prediction estimation.

Введение

В последнее время наблюдается увеличение количества публикаций, посвященных поиску новых методов прогнозирования распространения примесей в атмосферном воздухе. Однако количество публикаций по данному направлению в странах Восточной Европы, включая Россию и Украину, в целом значительно уступает количеству аналогичных публикаций в западных странах. Вместе с тем, за последние 10 лет, как в западных, так и в восточных странах существующие методики расчета распространения загрязнений в атмосфере существенно не обновлялась. В Украине, России, Белоруссии и странах СНГ продолжает действовать общенормативный документ ОНД-86 [1], а в США и ряде других западных стран используются официальные программы Агентства защиты ОПС (EPA) [2].

Несмотря на большое количество существующих публикаций по данному направлению практическое использование полученных научных результатов развито достаточно слабо. В настоящее время существует около 15 специализированных программных продуктов для прогноза распространения примесей в атмосферном воздухе. Среди отечественных программных продуктов наибольшее распространение получили "ЭОЛ", "Пленэр", УПРЗА "Эколог", "Кедр" и др., а зарубежные страны используют программные продукты семейства "CalPuff", "Plume", "TAPM", а также продукты EPA [2].

Сегодня очевидно, что построение нового поколения программных продуктов и развитие методов прогноза загрязнения атмосферного воздуха является актуальной задачей. При этом должны использоваться последние достижения

в области информационных технологий и современные способы "добычи" данных, такие как нейросетевой, спектральный и структурный анализ, позволяющие установить многие закономерности в случае, если имеются значительные массивы данных.

Методы и средства прогнозирования и загрязнения атмосферы

Сегодня специалистами в области экологического мониторинга и контроля качества ОПС при разработке новых методов распространения примесей в атмосферном воздухе рассматривается несколько подходов. Наибольшее распространение получили аналитико-эмпирические методы, основанные на аналитическом решении общего уравнения диффузии. Не менее широко распространены численные методы, основанные на приближенном решении общего уравнения диффузии с применением вычислительных методов. Применяются также и статистические методы, основанные на статистическом анализе данных наблюдений субъектов экологического мониторинга и т.п.

В основе большинства аналитико-эмпирических методов лежит общее уравнение диффузии (1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \\ = k_{T,x} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + k_{T,y} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \\ + k_{T,z} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + Q(\tau, x, y, z) - ac, \end{aligned} \quad (1)$$

где c – концентрация; τ – время; x, y, z – координаты; u, v – профили скорости ветра по

горизонтальным координатам x, y как функции высоты z ; w – скорость оседания ($w < 0$) или всплывания ($w > 0$) примеси; $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}$ – горизонтальные (вдоль x и y) и вертикальный (вдоль z) коэффициенты турбулентной диффузии; a – константа, обуславливающая разложение примеси вследствие процессов фотосинтеза, химических реакций и т.п.; $Q(\tau, x, y, z)$ – функция источника примеси.

В настоящее время существует большое количество моделей, основанных на использовании соотношения (1). Среди работ советских авторов следует отметить работы Берлянда [3] и др., а наиболее известными зарубежными моделями являются модели Гиффорда [4], Гиффорда-Ханна. При поиске аналитического решения соотношения (1) функция источника примеси $Q(\tau, x, y, z)$ обычно считается заданной, а различие подходов для определения коэффициентов $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}, a$ формирует разнообразие моделей. В работе [3] для легких стойких примесей, не имеющих собственной скорости всплывания или оседания ($w \approx 0$), а также не подлежащих разложению ($a = 0$) для точечного источника высотой H и условиях $z = 0$, $\frac{\partial c}{\partial \tau} \approx 0$ было получено решение (2):

$$C(x, y, 0) = \frac{Q(x, y, 0)}{2(1+n)k_1 \sqrt{\pi k_0} x^3} \cdot \exp\left(-\frac{u_1 H^{(1+n)}}{(1+n)^2 k_1 x} - \frac{y^2}{4k_0 x}\right), \quad (2)$$

где n, u_1, k_1, k_0 – параметры модели.

Для случая тяжелых примесей, имеющих собственную скорость оседания ($w < 0$) в [3] приводится следующее решение (3):

$$C(x, y, 0) = \frac{Q(x, y, 0) H^{w(1+n)} u_1^w}{2(1+n)^{1+2w} \Gamma(1+w) (k_1 x)^{1+w}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi k_0} x} \exp\left(\frac{u_1 H^{(1+n)}}{(1+n)^2 k_1 x} - \frac{y^2}{4k_0 x}\right), \quad (3)$$

где w – скорость оседания сферических частиц, которая определяется в соответствии с формулой Стокса (4):

$$w = 1.3 \cdot 10^{-2} \rho_n r_n^2, \quad (4)$$

где ρ_n – плотность частиц примеси, r_n – средний радиус частиц.

Используя принцип суперпозиции, в [3] также были получены решения для случая линейного и площадного источников.

Существует альтернативное решение задачи прогноза распространения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе, приведенное в [1]. Методика [1] является общепризнанной и на

настоящий момент является официальным документом, действующим на Украине, России, Белоруссии. В [1, 3, 4] отмечено, что одной из особенностей распределения наземной концентрации является наличие максимума $C_m(x_m, y, z)$, достижимого на расстоянии x_m от источника, причем для определения $C_m(x_m, y, z)$ и x_m используется условие $\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial y} = 0$. Это позволило получить решение для $C_m(x_m, y, z)$ и x_m в виде (5):

$$C_m(x_m, y, 0) = \frac{AFmn\eta}{H^2 \sqrt[3]{V_1 \Delta T}} Q(x_m, y, 0), \quad (5)$$

$$x_m = \frac{5-F}{4} dH,$$

где A – коэффициент, значение которого лежит в пределах от 140 до 250 и определяется в зависимости от климатических особенностей местности; F – коэффициент, определяющий оседание вредного вещества (для легких примесей $F = 1$); m, n – коэффициенты, учитывающие условия выхода примеси; η – коэффициент, учитывающий рельефные особенности местности, V_1 – расход примеси, ΔT – разность температур примеси и атмосферного воздуха; d – коэффициент, зависящий от параметров $V_1, \Delta T, H$; H – высота источника.

В источниках [1, 3] также имеются аналогичные решения для линейных и площадных источников.

Поскольку методика [1] является практическим руководством по расчету максимальных концентраций на территории стран СНГ, многие коэффициенты уравнений были получены эмпирическим путем для климатических особенностей этих стран.

Документ [1] как практическое руководство, стал основой большинства отечественных программных продуктов, которые используются в настоящий момент для расчета загрязнения атмосферного воздуха промышленными предприятиями и получения разрешений на выбросы. Наиболее распространенными программными продуктами, разработанными на основе ОНД-86, являются “ЭОЛ”, “Пленэр”, УПРЗА “Эколог”, “Кедр” и др.

Программные продукты семейства “ЭОЛ” [5] разработаны ООО “Софт Фонд” и представляют собой автоматизированную систему расчета выбросов вредных веществ в атмосферном воздухе. Расчетная модель реализована на основе [1]. Расчет загрязнений при помощи “ЭОЛ” состоит из нескольких этапов, включающих заполнение таблиц НСИ,

формирование задания на расчет, проведение расчета. Результатом работы являются таблицы концентраций. В Windows-версиях “ЭОЛ 2000”, “ЭОЛ 2000[h]” существует возможность формирования карт загрязнения атмосферы на основе растровых карт местности. Основными недостатками продукта “ЭОЛ” являются все недостатки [1], а достоинствами – наличие словарей ПДК и групп суммации веществ.

УПРЗА “Эколог” [6] разработан фирмой “Интеграл” и позволяет рассчитать приземные концентрации загрязняющих веществ в атмосфере в соответствии с [1]. Программный продукт официально рекомендован для применения на территории России и полностью реализует положения документа [1], а также содержит ряд дополнений, разработанных НИИ “Атмосфера” с 1990 по 2007 год, устраняющих часть недостатков [1], например, позволяет проводить расчет с учетом застройки местности. В отличие от “ЭОЛ”, данный программный продукт имеет модульную структуру, что позволяет внедрять дополнительные расчетные блоки. Основным недостатком программного продукта является отсутствие интеграции с другими продуктами, а также невозможность расчета вертикальной составляющей концентрации, а достоинствами продукта, кроме модульности, являются Windows-интерфейс и наличие справочников ПДК и групп веществ.

Основой **численных** моделей является приближенное решение общего уравнения диффузии (1) с использованием численных методов, при этом предполагается задание ряда допущений, накладывающих меньшее число ограничений по сравнению с аналитико-эмпирическими моделями. При этом постановка задачи моделирования становится существенно более общей, однако сложность решения возрастает. Разнообразие численных моделей расчета концентрации примеси достаточно велико и определяется в основном различием подходов, которые используются при задании коэффициентов $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}, a$. Наиболее известными моделями являются модели Лагранжа и Эйлера [7, 8]. Однако, в отличие от аналитико-эмпирического подхода, задание коэффициентов $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}, a$ не предполагает поиск точного решения, а основывается на наличии закономерностей, обнаруженных для конкретного исследуемого объекта, а также ряда гипотез, наиболее известными из которых являются гипотезы турбулентности Прандтля, Буссинеска, Колмогорова. Функция источника примеси $Q(\tau, x, y, z)$ в большинстве моделей также является заданной, причем для нестационарных моделей в основном используется ее численное представление, например, в виде временного табличного ряда.

Численная модель Лагранжа [7] представляет собой однослойную двумерную модель расчета распространения примеси и определяется соотношением (6):

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = Q(\tau, x, y, z) - ac. \quad (6)$$

Данная модель имеет существенные упрощения, в частности, отсутствует вертикальная составляющая $w \frac{\partial c}{\partial z}$, вместо которой вводится понятие вертикальной колонны воздуха, а также предполагается, что изменение концентрации $\frac{dc}{d\tau}$ в течение всего времени моделирования задается в виде (7):

$$\frac{dc}{d\tau} = F - R, \quad (7)$$

причем параметры F, R определяются в соответствии с [7].

Результатом расчета является усредненное значение концентрации по всей высоте колонны. Это не позволяет достаточно точно определять приземные концентрации, а отсутствие коэффициентов турбулентной диффузии $k_{T,x}, k_{T,y}, k_{T,z}$ в соотношении (6) приводит к большим ошибкам расчета в приземном слое.

Численная модель Эйлера [8] в отличие от модели Лагранжа представляет собой многослойную трехмерную модель расчета распространения примеси и определяется следующей системой соотношений (8):

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial \tau} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = \\ = k_{T,xy} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) - ac + Q(\tau, x, y, z). \\ \frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{T,z} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \end{cases} \quad (8)$$

Данная модель также имеет ряд допущений, влияющих на степень ее адекватности в меньшей степени по сравнению с моделью Лагранжа. Наиболее важными допущениями являются разбиение общего уравнения диффузии (1) на вертикальную и горизонтальную составляющие для упрощения процедуры поиска численного решения. Кроме того, предполагается, что коэффициенты турбулентной диффузии по осям x, y одинаковы, т.е.: $k_{T,x} = k_{T,y} = k_{T,xy} = const$.

При изучении процессов распространения примеси по высоте при помощи модели Эйлера обычно выделяют несколько горизонтальных слоев, при этом система (8) решается отдельно для каждого слоя. Параметр модели $k_{T,xy}$ определяется

эмпирическим путем, а параметр $k_{T,z}$ зависит от турбулентных характеристик взятого слоя. Так, для слоя атмосферы $z < 100$ параметр $k_{T,z}$ определяется в соответствии с (9), а для остальных слоев рассчитывается в зависимости от устойчивости атмосферы: для нейтральных и неустойчивых слоев используется формула (10), для устойчивых слоев расчет ведется в соответствии с (11):

$$k_{T,z}(z) = \chi u_* z / \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right), \quad (9)$$

$$k_{T,z}(z) = \chi u_* z e^{-4z/H} / \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right), \quad (10)$$

$$k_{T,z}(z) = \chi u_* z e^{-z/H} / \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right), \quad (11)$$

где L_* – параметр Монина-Обухова, $\chi = 0.43$ – постоянная Кармана; u_* – динамическая скорость примеси; параметры $u, v, \Phi \left(\frac{z}{L_*} \right)$ определяются в соответствии с [8].

После задания указанного набора параметров модель (8) решается численно на сетке, размеры ячейки при этом составляют 50×50 км. Для численного решения дифференциальных уравнений сегодня используются методы Рунге-Кутты, лежащие в основе решателей, разработанных на языках Фортран, Си. Результатом решения является поле концентраций загрязняющего вещества, полученных в узлах сетки.

По мнению многих специалистов, модель Эйлера допускается использовать только на крупных сетках (25×25 км и более), в то время как на более мелких она дает лишь приблизительные результаты. Для крупных сеток задание источников выбросов $Q(\tau, x, y, z)$ производится путем осреднения концентрации всех источников, приходящихся на указанную ячейку сетки. С уменьшением величины ячейки процесс задания функции $Q(\tau, x, y, z)$ усложняется, что приводит к существенным ошибкам задания исходных данных. Это не позволяет использовать указанную модель для территориально-распределенных объектов сравнительно небольших размеров (городов, районов и т.д.).

Несмотря на указанные недостатки, численные модели лежат в основе большинства существующих сегодня программных продуктов преимущественно зарубежного происхождения. Наиболее распространенными зарубежными продуктами являются “EMEP”, “CalPuff”, “AerMod”, “TAPM”, “Chimere”, а из отечественных продуктов существует ЭПК

“Zone”, обновление которого не производилось с 2003 года.

Интернет-версия программного продукта “EMEP” [9] разработана метеорологическим центром прогноза (MSC-e) в Великобритании и ориентирована, в первую очередь, на расчет распространения тяжелых металлов и ЛОС в атмосфере. Основой расчетной модели EMEP является модель Эйлера с некоторыми модификациями, позволившими сократить ошибку расчета. Интернет-версия модели не предполагает задание исходных данных пользователями, так как сопровождение модели осуществляется сотрудниками MSC-e. На настоящий момент модель позволяет строить карты распространения тяжелых металлов и ЛОС по данным 2006 года для 49 стран Восточной Европы, включая Россию, Украину, Белоруссию. Для построения карты достаточно выбрать страну и указать тип примеси. Модель использует крупную сетку 50×50 км, что позволяет получить приблизительные данные о состоянии воздуха. Крупным недостатком программного продукта “EMEP” является невозможность построения карт для неорганических соединений.

Программный продукт “CalPuff” [10] разработан компанией “Earth Tech” (Concord) и представляет собой комплексную систему прогноза метеорологических показателей и расчета распространения загрязнений в атмосферном воздухе. В состав продукта входят три главных компонента: CalMet, CalPuff, CalPost. Метеорологический препроцессор CalMet используется для моделирования полей температуры и направления ветра в зависимости от условий региона и рельефных особенностей местности. Транспортно-дисперсионная модель CalPuff предназначена для расчета распространения примеси, а модель постобработки CalPost необходима для визуализации результатов расчета.

Расчетная модель каждой из компонент системы реализована численно на языке Фортран и распространяется с открытыми исходными кодами. Обмен исходной информацией между компонентами системы осуществляется при помощи текстовых файлов. Система имеет ряд преимуществ по сравнению с отечественными программными продуктами, так как учитывает динамику метеорологических показателей. Недостатки системы сводятся к усложненной процедуре ввода исходных данных и отсутствию встроенных средств их редактирования. Ограниченное быстродействие (для 218 источников и 425 узлов расчет производится около 95 часов [11]), а также неопределенность исходных данных не позволяют использовать данный продукт на территории Украины, где для среднего

промышленного района количество источников может составлять сотни тысяч.

В основе **статистических** моделей лежат решения дифференциального уравнения (1), полученные по подобию известных аналитико-эмпирических решений, причем коэффициенты определяют либо эмпирическим путем, анализируя большие объемы исходных данных, либо используют известные теории (Тейлора, Гаусса и др.). Как в первом, так и во втором случае для определения эмпирических коэффициентов могут использоваться любые статистические методы, например, спектральный анализ Фурье, метод АРСС, регрессионный анализ, а также изучение описательных статистических характеристик. Существенным недостатком статистических моделей является зависимость от рельефных, промышленных, климатических особенностей конкретной местности, что не позволяет применить разработанную модель даже на соседних территориях (как правило, для этого может потребоваться значительная адаптация).

Наиболее известными моделями, использующими указанный подход, являются модели факела “Лагранжа – Гаусса”, а также наиболее простые зависимости вида (12), учитывающие только дисперсионные коэффициенты:

$$C(x, y, z) = \frac{Q(x_i, y_i, z_i)}{2\pi^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right), \quad (12)$$

где $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ – дисперсионные коэффициенты, учитывающие характер распределения примеси по осям x, y, z в зависимости от климатических, промышленных, рельефных и др. особенностей местности и определяющиеся эмпирическим путем.

Ошибка данной модели существенно зависит от правильности подбора параметров $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. В ряде случаев, особенно для слабо шероховатых незастроенных поверхностей и ограниченного числа источников модель имеет достаточно высокую достоверность.

Другой распространенной моделью, наиболее часто используемой в программных продуктах, является модель факела “Лагранжа-Гаусса” (13):

$$C(x, y, z) = \frac{Q(x_i, y_i, z_i)}{2\pi\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right). \quad (13)$$

В данной модели учитывается высота источника H , а также средняя скорость ветра u по направлению оси x , что приводит к

получению более достоверных результатов в сравнении с (12). Основными недостатками модели является сложность определения коэффициентов $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$.

Описанные модели, а также основанная на них официальная методика ISC3 получила широкое распространение в ряде зарубежных стран, так как является практической основой расчета концентраций примеси для разработки программных продуктов. Рассмотренный ранее программный продукт “CalPuff” также реализует данные модели.

Автором были также проанализированы основные возможности и других продуктов расчета распространения примеси в атмосфере. Сравнительная характеристика их возможностей показана в таблице 1.

Таблица 1. – Сравнение возможностей программных средств для расчета распространения примесей в атмосфере

Сравнительная характеристика	“ЭОЛ2000”	“Пленер”	УПРЗА “Эколог”	КИС “Кедр”	“ЕМЕР”	“CalPuff”	“AerMod”	“TAPM”	“Chimere”
Интернет-версия					+				+
Сеансовость	+		+			+	+	+	
Модульность			+	+		+	+	+	
Наличие справочников	+	+	+	+					
Поддержка картографии	+		+	+	+	+	+	+	+
Возможность печати	+		+	+		+	+	+	
Импорт и экспорт				+		+	+	+	
Базы данных				+	+				+
Точность расчета	±	±	±	±	-	+	+	+	-
Скорость расчета	+	+	+	+	+	±	±	±	+
Метеорологический препроцессор						+	+	+	
3D - визуализация	-	-	-	-	-	+	+	-	-

Анализ данных таблицы 1 показывает, что немногие программные продукты применяют современные технологии (например, поддержку сеансовости, баз данных и т.п.). Сравнительно малое количество программных продуктов позволяет осуществлять прогноз метеорологических показателей, также слабо развит ввод географической информации, а возможностью 3D-визуализации не обладает ни один из отечественных аналогов.

Таким образом, существующие сегодня средства прогноза состояния атмосферного воздуха не позволяют эффективно решать основные задачи экологического мониторинга, предусмотренные законодательством Украины. Связано это с различием используемых подходов и получаемых результатов. Неоднородность исходных данных, а также отсутствие ряда показателей, необходимых для расчета концентрации загрязняющего вещества с использованием того или иного подхода, характерно для большинства существующих методов. В определенных случаях это не позволяет использовать часть методов вообще, другие методы требуют предварительной адаптации к конкретному объекту путем эмпирического уточнения коэффициентов уравнений, лежащих в основе метода, третьи не учитывают климатические и рельефные особенности местности или дают значительные погрешности расчета, соизмеримые с исходными значениями концентраций.

Рассмотренные в рамках различных подходов методы и средства предполагают, что выбросы вредных веществ для каждого из источников известны. На практике, однако, количество стационарных источников для промышленного города средних размеров может составлять до 100 тыс., причем выбросы большинства из них не контролируются субъектами мониторинга, а определяются предприятиями самостоятельно на этапе инвентаризации выбросов. Исходя из этого, рассмотренные методы и средства, в основе которых положено общее уравнение диффузии (1), оказываются неприменимы. Это является **главной причиной** невозможности использования программных средств. Таким образом, поиск новых методов прогноза распространения примесей в атмосфере, ориентированных на значительное сокращение объемов исходных данных, имеющих низкую достоверность, является актуальной задачей.

Постановка задачи и разработка информационной модели расчета распространения примеси

При разработке новых методов расчета распространения примеси в атмосфере необходимо использовать данные наблюдений за состоянием атмосферного воздуха, собираемых субъектами экологического мониторинга (областными и региональными гидрометеоцентрами, СЭС и др.). Сегодня в городах Украины на стационарных постах контроля загрязнения атмосферного воздуха собирается значительный объем экологической информации. В год общее количество наблюдений на этих постах включает от 5 до 10 тыс. для одного загрязняющего вещества. Для

ряда крупных городов количество наблюдений уже составляет более 100 тыс. наблюдений в год, а для Украины в целом – 5-10 млн. в год. Кроме информации о концентрациях примеси имеется существенно больший объем метеорологических наблюдений. Таким образом, количество имеющейся экологической информации очень значительно, что дает возможность построения прогнозных моделей распространения примесей в атмосферном воздухе. Однако, для разработки информационных моделей необходим поиск закономерностей в имеющихся базах данных экологической информации.

Для поиска закономерностей в указанных объемах информации необходима единая информационная модель для ее обработки, которая позволит объединить в единое целое комплекс новых и имеющихся методов прогноза и оценки состояния атмосферного воздуха. Эта модель является инструментальной базой для проведения дальнейших исследований.

Программные продукты, разработанные на основе предлагаемой модели, должны обеспечивать возможность решения следующих задач:

- накопление, хранение, предобработка исходных данных, собираемых субъектами экологического мониторинга;
- проведение анализа исходных данных и представление ее в удобном для пользователя формате;
- проведение прогнозов распространения примеси в атмосферном воздухе по реальным данным субъектов мониторинга;
- обеспечение помощи в принятии решений экспертами (например, при выдаче разрешений на выбросы).

Исходя из поставленных задач, информационная модель должна обладать следующим набором функций:

- формировать набор исходных данных с внутренней структурой представления на основе данных, предоставляемых субъектами экологического мониторинга в форматах обмена экологической информацией (АСОИЗА, SQL);
- обеспечивать простоту интеграции любого из методов расчета распространения примеси;
- обеспечивать предобработку исходной информации и определять базовый набор статистических, динамических и других показателей, которые необходимы для работы большинства методов;
- сохранять информацию, полученную на промежуточных шагах обработки;
- восстанавливать результаты расчета, если используемый набор исходных данных ранее уже обрабатывался конкретным методом;

- производить оценку качества прогноза каждого из методов, интегрированного в информационную модель путем определения критериев значимости;

- предоставлять методам информацию о значимости, позволяющий автоматически корректировать его внутренние параметры с целью уменьшения ошибки прогноза;

- информировать о проводимой оценке качества работы метода;

- выполнять постобработку выходной информации.

Информационная модель должна использовать три группы исходных данных:

- метеорологическая информация;

- информация о концентрациях примеси, собираемая субъектами экологического мониторинга;

- географическая информация.

Информационная модель должна предоставлять следующие виды выходной информации:

- временные ряды прогнозных значений концентрации примеси, полученные с использованием методов краткосрочного и долгосрочного прогнозирования;

- восстановленные поля концентраций загрязняющих веществ, полученные путем использования методов пространственной аппроксимации, представленные в виде пространственных графиков и изображений поля с возможностью наложения и топографической привязки географических карт, экспортированных из распространенных ГИС систем;

- резюмирующая информация для экспертов в области охраны ОПС, позволяющая оценивать принятые решения.

Для реализации рассмотренных функций была разработана структура информационной модели расчета загрязнения атмосферы (см. рис. 1), которая включает 3 стадии обработки экологической информации: предобработку, обработку и постобработку. Предлагаемая структура содержит:

- *модуль импорта информации*. Данный модуль используется для перевода информации, предоставленной субъектами экологического мониторинга из распространенных форматов в формат внутреннего представления в виде SQL команд. Сегодня существует несколько подобных форматов, однако на Украине используется, в основном, формат АСОИЗА. Модуль импорта также позволяет преобразовывать географическую информацию, которая представляет собой векторные карты конкретного территориально-распределенного объекта, например, в формате MIF (MapInfo Interchange Format);

- *база исходных данных*. Представленная в виде SQL запросов информация в зависимости от ее типа распределяется на три блока: информация о концентрациях загрязняющих веществ, метеорологическая и географическая информация. Следует отметить, что для представления информации в двух первых блоках могут быть использованы стандартные типы данных, в то время как для представления географической информации необходимы особые типы данных, не входящие в спецификацию языка SQL, что ограничивает выбор средств реализации. При разработке модели также учитывалась возможность ее применения в многопользовательской Интернет-среде. Во избежание известных ошибок (взаимоблокировка, “борьба за ресурсы” и т.п.), неизбежно возникающих при выполнении подобных приложений был предложен следующий принцип: любые данные, исходящие от субъектов мониторинга, не подлежат модификации и удалению. С этой целью в структуру информационной модели вводится еще один дополнительный блок, данные в который заносятся на этапе предварительной обработки исходных данных и которые определяются системой автоматически. Блок дополнительной информации содержит, например, значения статистических показателей или расстояний между постами экологического мониторинга и другие данные, которые используются большинством методов. При определении аномальных значений данный блок содержит ссылки на элементы, которые следует считать аномальными, при этом сами значения не удаляются, что способствует целостности исходных данных;

- *сортировка*. Так как исходные данные от субъектов мониторинга могут поступать в неопределенном порядке, необходимо выполнять сортировку каждый раз при добавлении новых данных в базу, так как для большинства методов прогнозирования важен порядок наблюдения во времени. Перечень полей, по которым выполняется сортировка, зависит от структуры базы данных конкретного программного обеспечения, однако порядок сортировки определяется следующим образом: по дате наблюдения, по постам наблюдения, по ингредиентам, по метеорологическим данным;

- *удаление аномальных наблюдений*. На данном этапе предварительной обработки производится исключение из дальнейшей обработки или коррекция исходных данных, которые являются аномальными. Аномальными наблюдениями считаются: дуближи, которые могут возникать при повторном импорте данных, наблюдения, выходящие за допустимые границы диапазона, а также наблюдения,

выходящие за пределы, определяемые аномальными критериями;

- *инициализация параметров.* Данный этап предусматривает расчет и инициализацию параметров, которые не зависят ни от времени, ни от пространственных характеристик, а зависят только от типа территориально-распределенного объекта и являются общими для большинства методов расчета. Большая часть статистических методов используют ряд эмпирических и статистических параметров и закономерностей. Такими параметрами, в первую очередь, являются скорость оседания или всплывания для тяжелых примесей, определяемая в соответствии с (4), а также основные статистические показатели, которые также используются в ряде методов. Существует возможность определить указанные параметры для наиболее распространенных примесей заранее с целью сокращения времени расчета;

- *расчет осредненных месячных и годовых концентраций и метеорологических параметров.* Среднемесячные и среднегодовые концентрации используются при поиске закономерностей изменения концентраций в окрестности стационарного поста мониторинга для выявления трендов, всплесков и сезонных составляющих. В результате осреднения концентраций за счет уменьшения объема информации удаляются и характерные шумы, всегда присутствующие в исходных временных рядах концентраций загрязняющих веществ. Среднемесячные и среднегодовые данные могут быть использованы также при долгосрочных прогнозах (от 5 лет и более). В некоторых методах долгосрочного прогнозирования требуется определять эмпирическим или расчетным путем некоторое приближение прогнозного значения на конце интервала прогноза. Кроме того, за счет сокращения набора данных становится доступным также и визуальное изучение среднемесячных и среднегодовых концентраций в виде графиков, таблиц, а поэтому указанная информация может быть доступна на пользовательском уровне;

- *расчет пространственных отношений.* Для методов пространственной аппроксимации исходных данных крайне важно знать пространственные отношения, связывающие между собой посты и источники выбросов. Подобные отношения чаще всего представляют собой географические координаты местности, все остальные характеристики являются производными. Для определения координат в настоящее время используются современные ГИС с использованием GPS технологии. Точность GPS систем определяется количеством спутников, видимых с точки расположения GPS-приемника и ошибок эфирометра

(неточностей данных расположения спутника), и лежит в пределах от 6 до 12 метров.

Производными пространственными характеристиками, определяемыми на основе географических координат, являются:

1) декартовы координаты всех постов наблюдения и источников выбросов, определенные относительно некоторой точки, называемой точкой привязки;

2) расстояния от точки привязки до всех постов наблюдения и источников выбросов;

3) расстояния от постов и источников выбросов между собой;

4) азимуты углов между постами и источниками выбросов и выбранного направления.

Для расчета расстояний и определения декартовых координат может использоваться модифицированная формула гаверсинусов [12], а для определения азимута – формулы (14):

$$A^i = \begin{cases} \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i \geq 0, D_y^i \geq 0 \\ \pi - \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i < 0, D_y^i \geq 0 \\ \frac{\pi}{2} - \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i \geq 0, D_y^i < 0 \\ \frac{\pi}{2} - \arccos\left(\frac{D_x^i}{D_{nt}^i}\right), D_x^i < 0, D_y^i < 0 \end{cases}, \quad (14)$$

$$D_{nt}^i = \sqrt{D_x^i + D_y^i},$$

где D_x^i, D_y^i – проекции координат i -той точки на оси выбранной системы координат;

- *аппроксимация.* В связи с большой неоднородностью исходных данных субъектов мониторинга на последнем этапе предобработки выполняется приближенная в узлах аппроксимация. Неоднородность исходных данных (пропуски значений и др.) возникает в случае отсутствия наблюдений за некоторый период времени, либо при удалении аномальных значений. Однако условие однородности исходных данных зачастую является обязательным для построения моделей краткосрочного прогноза, в которых каждое последующее значение зависит от значений, полученных на предыдущих шагах. Наибольшее распространение получили полиномиальные функции Ньютона и Лагранжа, которые обладают высокой точностью;

- *краткосрочное прогнозирование.* На данном этапе предполагается осуществлять краткосрочный прогноз путем использования одного из методов краткосрочного прогнозирования (см. рис. 1). Входная информация для любого из методов является одинаковой и представлена временными рядами

концентраций одной или нескольких примесей, выбираемых пользователями, временными рядами метеорологических показателей и таблицами блока дополнительной информации, в которых хранятся результаты, полученные на стадии предобработки.

Любой метод может также использовать экспертную информацию, которая представляет собой набор показателей для оценки качества его работы. Как правило, показатели представляют собой зависимости, задаваемые в виде таблиц (например, зависимость общей ошибки прогноза от глубины прогноза). На основе указанных зависимостей каждый метод может корректировать окончательный результат прогноза с целью уменьшения общей ошибки. Однако, поскольку не каждый метод позволяет корректировать результат своего прогноза, на рис. 1 данная возможность обозначена штрихпунктирной линией.

Выходная информация каждого из методов прогноза представлена временными рядами прогнозных значений, который вместе с набором пользовательских параметров (начало прогноза, конец прогноза, набор загрязняющих веществ, название метода прогноза и т.д.) заносится в таблицы информационного блока результатов прогноза, что необходимо для исключения повторного прогнозирования одинаковых входных данных;

- *долгосрочное прогнозирование.* На данном этапе выполняется долгосрочный прогноз изменения концентраций загрязняющих веществ (сроком на 5 и более лет) на постах экологического мониторинга путем применения одного из методов долгосрочного прогноза. Входной информацией для большинства методов являются осредненные концентрации загрязняющих веществ и их статистические характеристики, полученные ранее. Применение экспертной информации, как и в методах краткосрочного прогнозирования, состоит в программной коррекции результатов прогноза с целью уменьшения общей ошибки прогноза. Выходная информация методов долгосрочного прогноза, как и выходная информация методов краткосрочного прогноза, представляет собой временной ряд прогнозных значений, который вместе с набором пользовательских параметров заносится в таблицы информационного блока результатов прогноза;

- *восстановление поля концентраций.* На данном этапе предполагается построение полей концентраций примеси над территориально-распределенным объектом по исходным данным субъектов экологического мониторинга путем использования методов восстановления полей концентраций (см. рис. 1). Эти данные представляют собой реальные наблюдения, субъектов экологического мониторинга, либо

прогнозные значения, полученные ранее. Входная информация для каждого из методов восстановления поля концентраций представлена в виде:

- 1) концентраций примеси на всех постах мониторинга за указанную дату;
- 2) таблиц блока географической информации;
- 3) месторасположения стационарных постов наблюдений;
- 4) таблиц блока дополнительной информации;
- 5) метеорологической информации за указанную дату.

Кроме этого, каждый из методов может также использовать экспертную оценку пространственного прогноза, формируемую соответствующим блоком, для коррекции результата с целью уменьшения общей ошибки работы метода.

Выходная информация методов восстановления полей концентраций представляет собой массив данных, который представляет собой координаты и рассчитанное значение концентрации для точек восстановления;

- *экспертная оценка прогноза.* На данном этапе формируются показатели, позволяющие эксперту оценить качество прогноза каждого из методов в отдельности применительно к рассматриваемому объекту. При этом для повышения качества прогноза методов наиболее важной считается апостериорная оценка. Оценивается качество прогноза, как правило, при помощи интегрального метода, причем наиболее важными критериями считаются: общая ошибка прогноза, качество исходных данных, качество метода оценки, качество подбора весовых коэффициентов для формирования общей оценки и т.п.;

- *экспертная оценка пространственной аппроксимации.* Для проведения экспертной оценки пространственной аппроксимации предполагается формирование набора показателей. Качество прогноза оценивается экспертом по указанному набору, причем наиболее важными критериями считаются: общая ошибка аппроксимации, характеристики метода, перечень используемых наборов исходных данных, количество точек с известными значениями концентрации (постов мониторинга и источников выбросов), качество исходных данных, качество подбора весовых коэффициентов для формирования общей оценки и т.п.;

- *формирование графиков.* По запросу пользователя на данном этапе предполагается формирование графиков временных рядов по результирующим данным. Для визуализации апостериорной оценки качества прогноза

предусматривается возможность наложения результатов прогноза на реальные данные, собранные субъектами мониторинга. Для оценки качества состояния атмосферного воздуха на графиках поверх выходной информации могут выводиться критерии качества (ПДК, среднее значение и т.п.), обеспечивая возможность анализа данных;

- *формирование таблиц.* На данном этапе по соответствующему запросу пользователя могут быть получены таблицы, содержащие результаты прогноза, что является менее наглядным, но более информативным способом представления выходной информации. На данном этапе может также выполняться экспорт информации с использованием стандартных интерфейсов для согласования с другими программными продуктами обработки данных;

- *формирование результатов экспертной оценки прогноза и пространственной аппроксимации.* Данный этап предусматривает выдачу результатов экспертной оценки прогноза и пространственной аппроксимации эксперту в виде графиков, таблиц и др. для визуальной оценки работы каждого из методов прогноза и пространственной аппроксимации;

- *формирование полей.* На данном этапе производится формирование поля концентрации в виде статического или анимированного изображения по данным, полученным в результате пространственной аппроксимации;

- *формирование карт.* Данный этап предполагает построение географических и топологических карт, которые служат базовой подложкой при нанесении данных пространственной аппроксимации и облегчают взаимодействие пользователя с системой;

- *модуль визуализации* обеспечивает вывод готового изображения на экран ПК;

- *модуль управления* обеспечивает взаимодействие пользователя с системой и управляет работой системы в целом.

В дальнейшем представленную информационную модель можно использовать в качестве основы для построения информационно-аналитических программных комплексов прогнозирования распространения загрязняющего вещества над территорией произвольного объекта.

Выводы

Выполнен анализ существующих методов и средств расчета распространения примеси в приземном слое атмосферы. В результате анализа установлено, что существующие сегодня программные продукты не позволяют в полном объеме решать задачи экологического мониторинга, определенных в соответствии с законодательством Украины. Основным

недостатком всех проанализированных методов и средств является необходимость задания функции источника примеси, которая сегодня достоверно не определяется для большинства источников. Исходя из этого, была предложена информационная модель расчета распределения примеси в приземном слое атмосферы по реальным данным, собираемым субъектами экологического мониторинга.

Литература

1. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий ОНД-86.– Л.: Гидрометеиздат, 1987. – 68 с.
2. US EPA: United States Environmental Protection Agency // Эл. ресурс. URL: <http://www.epa.gov>.
3. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеиздат, 1985. – 272 с.
4. Атмосферная диффузия и загрязнение воздуха // Под ред. А.С. Моница. М.: Ин. лит., 1962. – 512 с.
5. СФ Продукты – экология: ЭОЛ, ЭОЛ 2000, ЭОЛ 2000[h] // Эл. ресурс. URL: <http://www.sfund.kiev.ua/rus/products/>.
6. Унифицированная программа расчета загрязнения атмосферы “Эколог”. Версия 3.0. Руководство пользователя // Эл. ресурс. URL: <http://integral.ru/Integral/userguides>.
7. Tsyro S.G. The EMAP Lagrangian Acid Deposition Model (LADM) // El. resource. URL: <http://www.emep.int/acid/ladm.html>.
8. Travnikov O., Ilyin I. Regional model MSCE-HM of heavy metal transboundary air pollution in Europe. MSC-E Technical Report // El. resource. URL: http://www.msceast.org/events/review/hm_description.html.
9. Meteorological Synthesizing Centre – East – Countries – Ukraine // El. resource. URL: <http://www.msceast.org/countries/Ukraine/>.
10. Scire J. S., Strimaitis D. G., Yamartino R. J. A User’s Guide for the CALPUFF Dispersion Model (Version 5). Earth Tech, Inc., Concord, 2000.
11. Павлий В.А., Аверин Г.В. Информационно-аналитические модели переноса примесей над территориально-распределенными объектами // Тези доп. міжнар. наук. конф. “Інтелектуальні системи прийняття рішень та прикладні аспекти інформаційних технологій” (ISDMIT 2006), Євпаторія, 2006. – С. 108 – 111.
12. GIS-Lab: Вычисление расстояния и начального азимута между двумя точками на сфере // Эл. ресурс. URL: <http://gis-lab.info/qa/great-circles.html>.

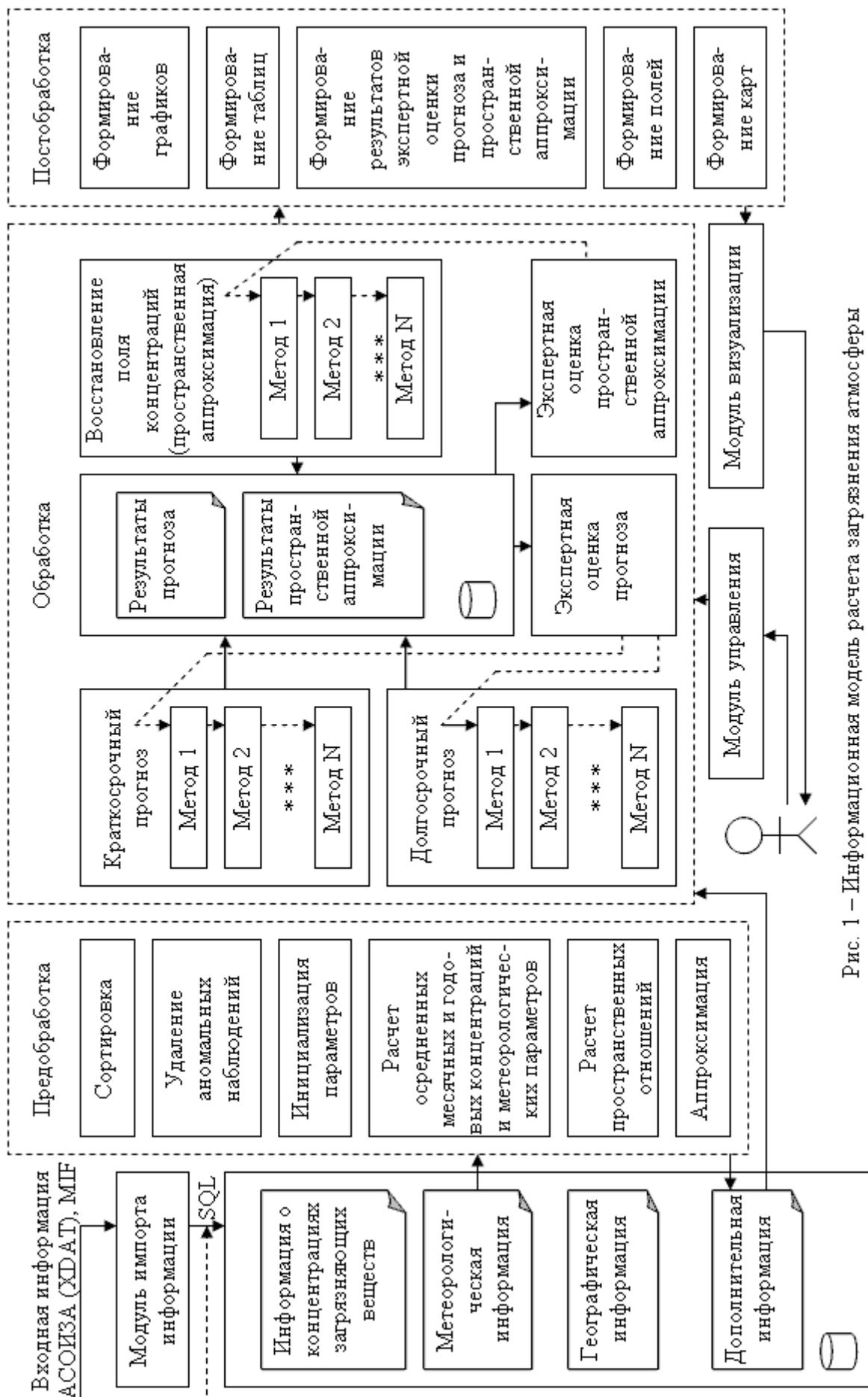


Рис. 1 – Информационная модель расчета загрязнения атмосферы