

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ ВРЕДНЫМИ ГАЗАМИ

Г.В. Аверин, В.А. Павлий

Донецкий национальный технический университет

ВСТУПЛЕНИЕ

В настоящее время субъектами экологического мониторинга собрано большое количество экспериментальных данных по загрязнению атмосферы. Контроль загрязнения атмосферы ведется Гидрометеослужбой Украины в 53 городах по 8-12 ингредиентам вредных веществ, количество стационарных постов составляет от 4 до 10 в зависимости от размеров города. В течение длительного времени (с 70-х – 80-х годов) накоплены большие информационные базы данных параметров, связанных с загрязнением атмосферы. Имеющиеся данные наблюдений могут быть использованы для разработки термодинамических моделей, которые описывают соответствующие процессы загрязнения атмосферного воздуха и формирования метеопараметров.

Для построения таких моделей необходимо применение методов анализа временных рядов, поскольку концентрации загрязняющих веществ и метеопараметров атмосферы динамически меняются во времени. На рис. 1 показан типичный график изменения концентрации диоксида азота NO_2 , а на рис. 2 – график изменения температуры атмосферного воздуха.

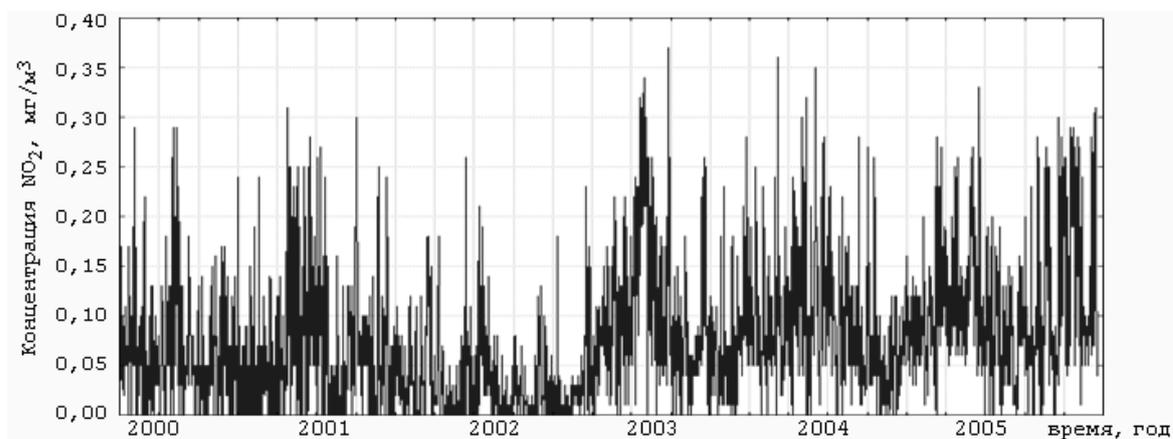


Рис. 1 – График изменения концентрации диоксида азота (NO_2) на стационарном посту контроля загрязнения атмосферы №2 в г. Донецке за 6 лет

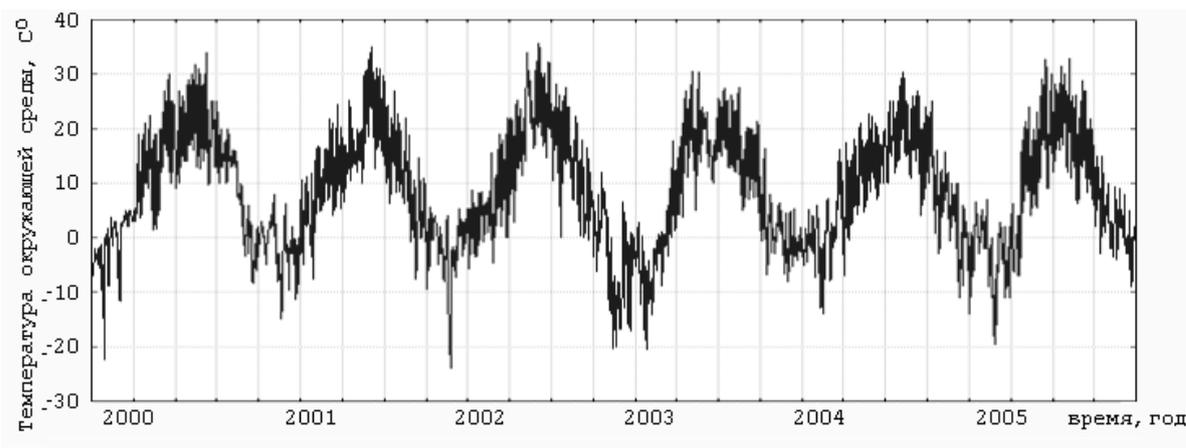


Рис. 2 – График изменения температуры атмосферного воздуха на метеопосту в г. Донецке за 6 лет

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И РАЗРАБОТКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Основной задачей данной работы является разработка термодинамических моделей краткосрочного прогнозирования концентрации загрязняющих веществ в атмосферном воздухе на основе данных наблюдений, полученных на стационарных контрольных постах загрязнения атмосферы.

При построении термодинамических моделей загрязнения атмосферы необходимо использование основных уравнений термодинамики. Наиболее универсальной зависимостью, описывающей термодинамические процессы в атмосферном воздухе, является политропа:

$$p\nu^n = const \quad (1)$$

Величина показателя политропы n в общем случае может принимать любые значения от $-\infty$ до $+\infty$ в зависимости от типа рассматриваемого процесса.

Для произвольных точек на кривой политропного процесса уравнение (1) представляется в виде (2):

$$p_1\nu_1^n = p_2\nu_2^n \quad (2)$$

Политропы описывают многие виды термодинамических процессов, что позволяет применить их для описания динамики загрязнения атмосферы вредными газами.

Для построения термодинамической модели загрязнения атмосферы, были использованы экспериментальные данные о загрязнении атмосферного воздуха в г. Донецке за период с 2000 по 2005 год включительно. Данные представляют собой временные ряды значений концентраций загрязняющих веществ, которые контролировались на стационарных постах Донецкого Гидрометеоцентра с 12-ти часовыми интервалами. Измерения проводились на 6 стационарных постах по общепринятым методикам согласно нормативному документу [1]. Общий объем экспериментальных данных за указанный период составляет более миллиона наблюдений. Для исследований в работе были использованы временные ряды диоксида азота (NO_2), аммиака (NH_3), диоксида серы (SO_2) и оксида углерода (CO). Кроме этого, использовались временные ряды температуры атмосферного воздуха.

Для удобства обработки информации среди собранных экспериментальных данных были удалены аномальные значения.

Для определения показателя политропы n согласно [2] можно использовать следующее уравнение (3):

$$n(\tau) = \frac{\lg p(\tau) - \lg p(\tau+1)}{\lg \nu(\tau+1) - \lg \nu(\tau)} \quad (3)$$

Величина $p(\tau)$ определяется из уравнения Менделеева-Клапейрона (4) при представлении загрязнителя идеальным газом:

$$p(\tau) = \frac{RT(\tau)}{\nu(\tau)} \quad (4)$$

Выбор уравнения (4) для описания состояния вредных веществ обоснован их малыми концентрациями в атмосферном воздухе.

В уравнениях (3)-(4): R – индивидуальная газовая постоянная вещества, $R = \frac{8,314}{\mu_i}$; $T(\tau)$ – абсолютная температура, $T(\tau) = t(\tau) + 273,15$; $\nu(\tau)$ – удельный объем, $\nu(\tau) = \frac{1}{C(\tau)}$; μ_i – молярная масса, $C(\tau)$ – концентрация загрязняющего вещества; τ – время, измеряемое в 12-ти часовых интервалах.

С учетом (4) уравнение (3) можно представить в виде (5):

$$n(\tau) = 1 + \log \frac{C(\tau)}{C(\tau+1)} \frac{273,15 + t(\tau)}{273,15 + t(\tau+1)} \quad (5)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

По формуле (5) были рассчитаны временные ряды значений показателя политропы n для различных процессов загрязнения атмосферного воздуха вредными веществами. На рис. 3 приведены временные ряды изменения показателей политропы для диоксида азота, аммиака, диоксида серы, оксида углерода соответственно. Как видно из рисунка 3, значения показателей политропы достаточно близки к единице, среднее значение составляет от 0,999479 до 1,040459, среднеквадратическое отклонение от 0,002503 до 0,004753 (см. табл. 1).

Таким образом, можно отметить, что процессы загрязнения атмосферы близки к изотермическим процессам.

После визуального анализа, оценки спектральных характеристик и изучения динамики изменения временных рядов для исследований и построения моделей был выбран метод авторегрессии и проинтегрированного скользящего среднего (АРПСС). Модель любого динамического процесса согласно данного метода описывается тремя типами параметров, включающих как параметры авторегрессии (p), так и параметры скользящего среднего (q) [3]. Кроме этого, модель может определяться порядком взятой разности (d).

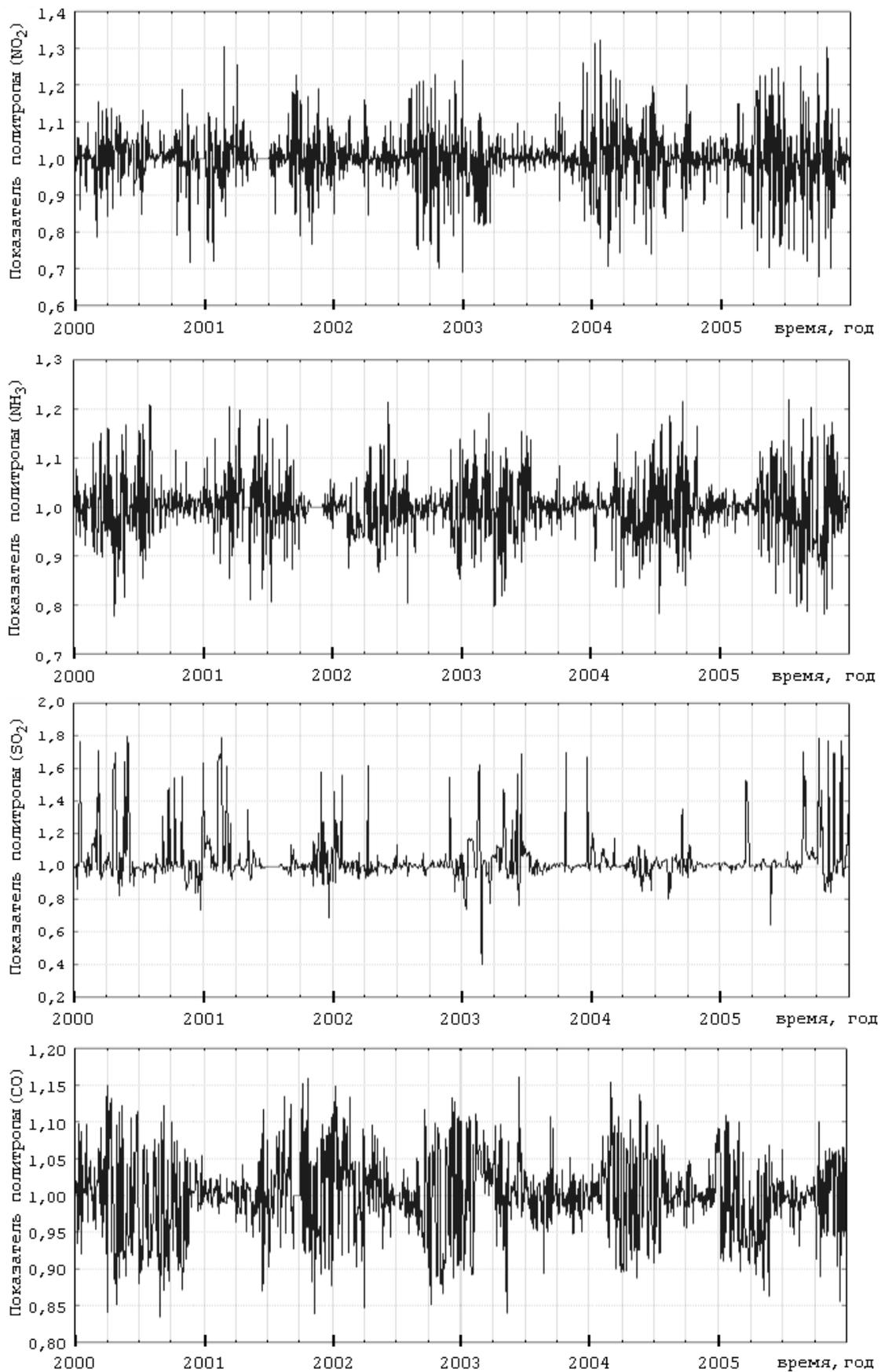


Рис. 3 – Графики изменения показателя микрограмм в процессах загрязнения атмосферного воздуха различными загрязнителями на стационарном посту №2 в г. Донецке

Таблица 1 – Статистические показатели, характеризующие динамику изменения величины n для политропного процесса при загрязнении атмосферного воздуха

Показатель политропы n при загрязнении атмосферы вредным веществом	Среднее	Минимум	Максимум	Дисперсия
NO ₂	0,999804	0,678407	1,322381	0,004753
NH ₃	0,999579	0,777167	1,219813	0,002933
SO ₂	1,040459	0,400715	1,798554	0,023283
CO	0,998631	0,834527	1,161281	0,002503

При помощи данного метода производился поиск системных закономерностей, характеризующих процесс загрязнения атмосферы конкретным ингредиентом. Соответствующий анализ моделей вида АРПСС при изменении параметров в пределах $0 \leq p, q \leq 2$, $0 \leq d \leq 1$ показал, что имеются общие системные закономерности при формировании процессов загрязнения атмосферы. В результате анализа было установлено, что наиболее оптимальная модель для описания динамики показателя политропы имеет вид АРПСС (0, 1, 2).

Известно, что модели АРПСС вида (0, 1, 2) описываются формулой (6):

$$n(\tau + 1) = n(\tau) + a(\tau) - q_1 a(\tau - 1) - q_2 a(\tau - 2) \quad (6)$$

Параметры коэффициентов уравнения (6), статистические показатели остатков и стандартные ошибки приведены в таблице 2.

Из таблицы 2 видно, что значения коэффициентов q_1 и q_2 для конкретного загрязняющего вещества отличаются незначительно друг от друга, что говорит о сходстве рассматриваемых процессов при распространении загрязняющего вещества в целом по городу. Поэтому следует сделать вывод о зависимости параметров модели от конкретного вида загрязняющего вещества (табл. 2).

Таблица 2 – Параметры модели АРПСС (0,1,2) согласно (6):

Ингредиент	Номер поста	q_1	Среднеквадратическое отклонение для q_1	q_2	Среднеквадратическое отклонение для q_2	Параметры остатков	
						Среднее остатков (M)	Дисперсия остатков (D)
NO ₂	2	0,777182	0,017516	0,218279	0,017664	0,000353	0,053710
NO ₂	4	0,719101	0,017099	0,277436	0,017518	0,003110	0,058670
NO ₂	5	0,721054	0,015958	0,269390	0,016164	0,001263	0,066906
NO ₂	7	0,728556	0,015537	0,265406	0,015707	-0,000390	0,064462
NO ₂	9	0,715968	0,015742	0,280457	0,016134	0,001318	0,065881
NH ₃	2	0,665204	0,017058	0,305204	0,017763	-0,000025	0,048901
NH ₃	7	0,699662	0,016974	0,291563	0,017327	0,001568	0,052429
NH ₃	9	0,631266	0,018144	0,323908	0,020584	0,000372	0,048735
NH ₃	14	0,774848	0,018418	0,218882	0,018701	0,000955	0,053695
SO ₂	2	0,727871	0,025569	0,233985	0,026129	-0,012533	0,108896
SO ₂	4	0,708045	0,028983	0,244395	0,029934	-0,000203	0,103386
SO ₂	5	0,718526	0,028028	0,241108	0,028460	-0,011051	0,072838
SO ₂	7	0,619412	0,033660	0,147415	0,045999	-0,013810	0,070979
SO ₂	9	0,794842	0,028698	0,161479	0,029076	-0,018334	0,054883
CO	2	0,545501	0,019294	0,362519	0,020884	0,000693	0,042494
CO	4	0,579933	0,019673	0,224407	0,021209	0,001818	0,024748
CO	5	0,502212	0,018445	0,352017	0,021394	-0,000564	0,033533
CO	7	0,505749	0,017445	0,407302	0,018615	0,000634	0,032659
CO	9	0,529399	0,015684	0,429007	0,016515	0,000235	0,038445

Также из таблицы 2 видно, что параметры остатков моделей отличаются незначительно. Математическое ожидание и среднеквадратическое отклонение остатков близки к нулю, что позволяет сделать вывод об адекватности предложенной модели.

Таким образом, алгоритм моделирования процессов загрязнения атмосферы вредными веществами может быть представлен с помощью термодинамической модели вида (6), где белый шум $a(\tau)$ представляет собой стохастическую модель остатков и задается соответствующим генератором с параметрами, приведенными в таблице 2. Из анализа значений коэффициентов q_1 и q_2 следует, что для определенного вида ингредиента в целом по городу также можно применить осредненные значения.

Указанная модель позволяет проводить краткосрочное прогнозирование динамики изменения коэффициента политропы n . При этом для определения прогнозируемого значения показателя политропы достаточно знать показатели политропы на двух предыдущих лагах.

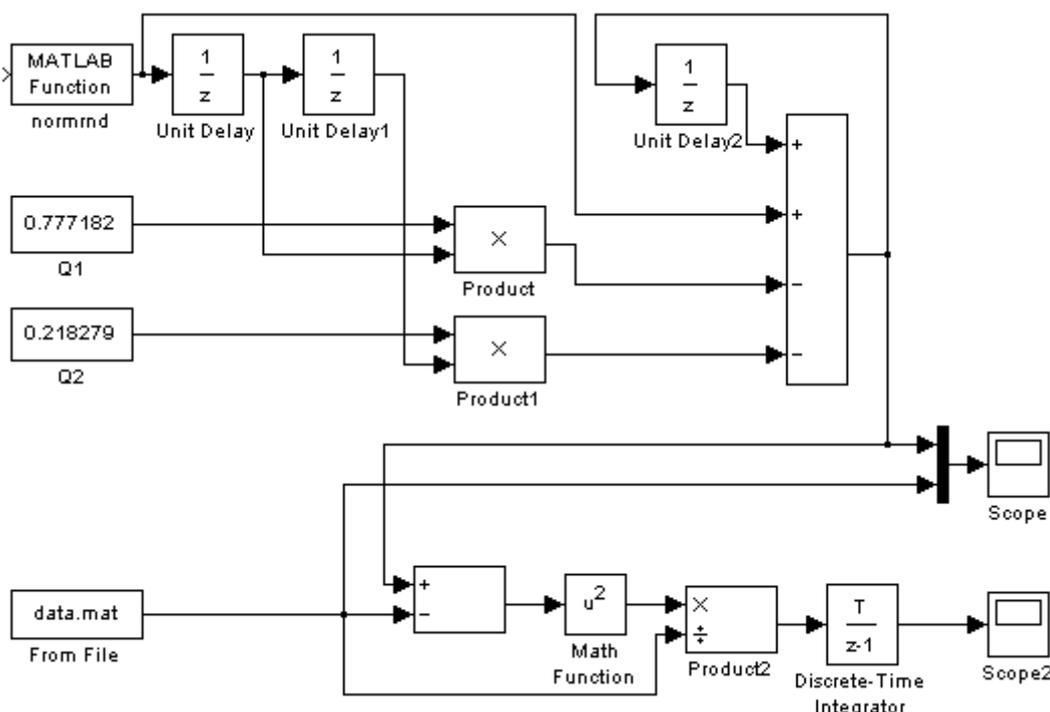


Рис.4. Объектно-ориентированная модель краткосрочного прогнозирования показателя политропы n диоксида азота (NO_2) по данным стационарного поста контроля загрязнения атмосферы №2 в г. Донецке

Рассмотрим объектно-ориентированную реализацию предложенной математической модели, выполненную в среде MatLab/Simulink [4,5], которая позволяет выполнить краткосрочное прогнозирование значения показателя политропы n для ингредиента NO_2 . Разработанная в соответствии с (6) модель показана на рис. 4.

Блок *normrnd* представляет собой генератор белого шума остатков $a(\tau)$, параметры которого представлены в таблице 2. Блоки *Unit Delay* и *Unit Delay1* используются для реализации задержки на 1 такт моделирования и позволяют определить $a(\tau - 1)$ и $a(\tau - 2)$ соответственно. Блок *Unit Delay2* позволяет определить значение $n(\tau)$, вычисленное на предыдущем шаге моделирования.

Представленная на рис. 4 математическая модель позволяет также оценить общую ошибку прогнозирования. Оценка ошибки выполняется путем расчета общепринятого критерия χ^2 согласно (7) и накопления общей ошибки на каждом шаге прогнозирования:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^t \frac{(n_t(i) - n_p(i))^2}{n_t(i)}, \quad (7)$$

где: t – число шагов прогнозирования, $n_t(i)$, $n_p(i)$ – прогнозное и реальное значение показателя политропы на i -ом шаге.

Реальные значения показателя политропы $n_p(i)$ принимаются из файла *data.mat* при помощи блока *From File*.

На рис. 5 показаны графики реальных и прогнозных (показаны пунктиром) значений изменения показателя политропы n диоксида азота (NO_2) по данным стационарного поста контроля №2 загрязнения атмосферы в городе Донецке.

График ошибки прогнозирования является кумулятивным и показан на рис. 6.

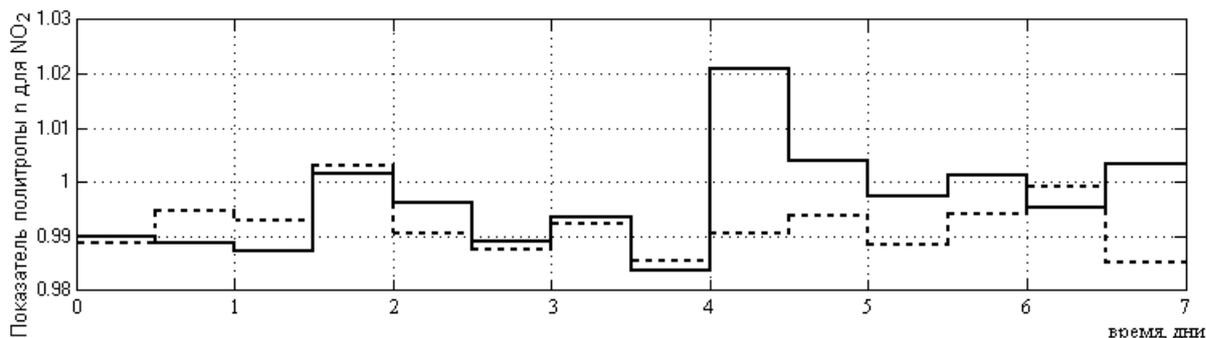


Рис.5. График прогноза показателя политропы n в процессе загрязнения атмосферного воздуха диоксидом азота (NO_2) по данным стационарного поста контроля загрязнения атмосферы №2 в г. Донецке

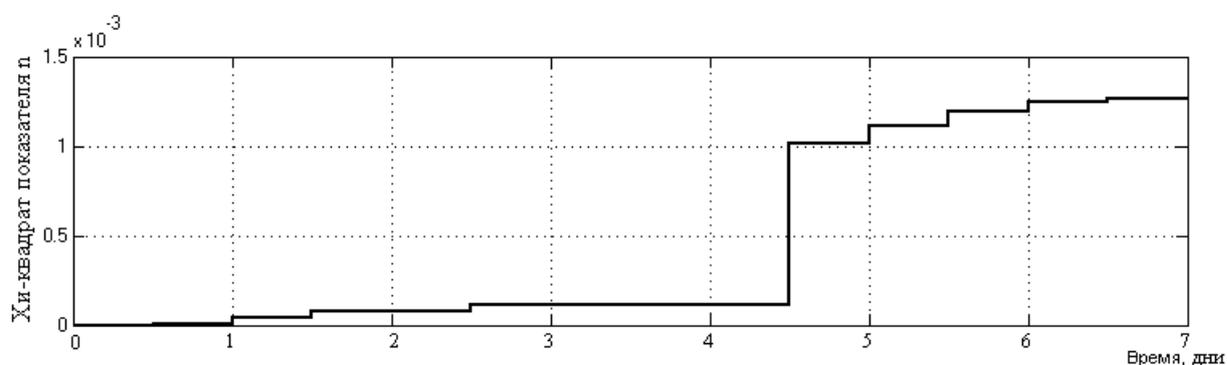


Рис.6. График общей ошибки прогнозирования показателя политропы n по критерию χ^2 .

Исходя из рисунка 6 видно, что суммарная ошибка за 7 дней составляет $1,25 \cdot 10^{-3}$, что является достаточно хорошим показателем. Таким образом, следует сделать вывод об адекватности предлагаемой модели.

При определении концентрации загрязняющего вещества, прогнозные значения коэффициента политропы n используются в уравнении (8), которое может быть получено из (5) путем логарифмирования:

$$C(\tau + 1) = \frac{C(\tau)}{\left(\frac{273,15 + t(\tau)}{273,15 + t(\tau + 1)} \right)^{\frac{1}{n(\tau) - 1}}} \quad (8)$$

Используя биномиальное разложение найдем, что:

$$C(\tau + 1) = C(\tau) / \left[1 + \left(\frac{1}{n(\tau) - 1} \right) \left(\frac{t(\tau) - t(\tau + 1)}{273,15 + t(\tau + 1)} \right) + \left(\frac{1}{n(\tau) - 1} \right) \left(\frac{2 - n(\tau)}{2n(\tau) - 2} \right) \left(\frac{t(\tau) - t(\tau + 1)}{273,15 + t(\tau + 1)} \right)^2 + \left(\frac{1}{n(\tau) - 1} \right) \left(\frac{2 - n(\tau)}{2n(\tau) - 2} \right) \left(\frac{3 - 2n(\tau)}{n(\tau) - 1} \right) \left(\frac{t(\tau) - t(\tau + 1)}{273,15 + t(\tau + 1)} \right)^3 + \dots \right] \quad (9)$$

Кроме этого, как следует из (8), для определения концентрации загрязняющего вещества необходимо также знать прогнозные значения температуры окружающей среды. Прогнозирование температуры окружающей среды является сложной задачей. Тем не менее, задача краткосрочного прогнозирования температуры окружающей среды в атмосферном воздухе решена и подробно изложена в работах [6-8].

ВЫВОДЫ

Предложенные термодинамические модели загрязнения атмосферы позволяют выполнять краткосрочное прогнозирование концентрации загрязняющего вещества.

Дальнейшие исследования предполагают изучение закономерностей термодинамических процессов загрязнения атмосферы с целью построения моделей долгосрочного прогнозирования.

РЕЗЮМЕ

Розроблено математичні моделі забруднення атмосферного повітря на контрольних постах суб'єктів моніторингу, які використовують алгоритми стохастичного моделювання. Запропоновано термодинамічні моделі короткострокового прогнозування забруднення атмосфери.

SUMMARY

Mathematical models of atmosphere air pollution on the control posts of monitoring subjects, using the algorithms of stochastic modeling are developed. Thermodynamic models of short-term forecasting of atmosphere pollution are offered.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. РД 52.04.186-89. Руководство по контролю загрязнения атмосферы.
2. В.А. Кириллин, В.В. Сычев, А.Е. Шейндлин. Техническая термодинамика. М.: Энергия. – 1974. – 447 с.
3. В.П. Боровиков, Г.И. Ивченко. Прогнозирование в системе Statistica в среде Windows. М.: Финансы и статистика. – 1999. – 382 с.
4. В.П. Дьяконов. MatLab 6/6.1/6.5 Simulink 4/5 основы применения. М.: Солон-Пресс. – 2004. – 767 с.
5. В.Г. Потемкин. Система инженерных и научных расчетов MatLab 5.x: - В 2-х т. Том 1 – М.: Диалог-МИФИ, 1999 – 336 с.
6. П.Н. Белов, Е.П. Борисенков, Б.Д. Панин. Численные методы прогноза погоды. Л.: Гидрометеиздат, 1989. – 376 с.
7. Гаврилов А.С. Математическое моделирование мезометеорологических процессов. Л.: ЛГМИ, 1988. – 96 с.
8. Гандин Л.С, Д.Л. Лайхтман, Л.Т., Матвеев, М.И. Юдин. Основы динамической метеорологии. Л.: Гидрометеиздат, 1955. – 647 с.