

УДК 504.75.05

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ ИСТОЧНИКА ВЫБРОСОВ С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЙ И ФАКТОРНОГО АНАЛИЗА

**М.Ф. Кожевникова<sup>1</sup>, В.В. Левенец<sup>1</sup>, д.ф.-м.н., К.А. Мец<sup>2</sup>,  
И.М. Неклюдов<sup>1</sup>, акад., И.Л. Ролик<sup>1</sup>, к.т.н., м.н.с.**

<sup>1</sup>*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»*

<sup>2</sup>*Вольногорский горно-металлургический комбинат, г. Вольногорск, Украина*

Представлен анализ распространения загрязняющих веществ в атмосфере в районе расположения предприятия циркониевого цикла в Украине. Разработана методика обработки данных по обнаружению источников загрязнения. Идентифицирован источник загрязнения по проведенным измерениям концентрации загрязнителей и по анализу движения воздушных масс в г. Вольногорск Днепропетровской области (Украина). Получены карты траекторий воздушных потоков и распределения в воздухе основных загрязняющих веществ на исследуемой территории.

### Введение

В настоящее время одним из главных направлений в охране окружающей среды является контроль и наблюдение за выбросами в атмосферу газовых и аэрозольных примесей предприятиями промышленного производства [1 - 4]. Выброшенная источником в атмосферу примесь постепенно осаждается на поверхность, оказывая негативное воздействие на здоровье людей, животных, на растительный покров земли. Контроль качества воздуха невозможен без определения регионов и основных источников загрязнения, оказывающих наибольшее влияние на загрязнение атмосферы.

Для идентификации источников загрязнения используются различные математические методы, в основе которых лежит решение обратной задачи переноса примеси. Эти методы позволяют по определенному числу точек наблюдений восстановить параметры источников загрязнения и выяснить их территориальное расположение.

Применяя на практике методы математического моделирования, можно дать оценку экологического и экономического ущерба, наносимого региону в результате загрязнения его почвы и водной поверхности веществами, попадающими в атмосферу в результате выбросов в нее побочных продуктов производства промышленных предприятий, расположенных на исследуемой территории.

Для качественного экологического контроля атмосферы актуальной задачей является разработка методики для идентификации источника загрязнения по концентрациям загрязняющих веществ, содержащихся в замерах воздуха, взятых на рассматриваемой территории, и анализу траекторий перемещения воздушных масс.

### Постановка цели научного исследования

Целью исследования является разработка методики для идентификации источников загрязнения по результатам замеров воздуха, полученных на территории г. Вольногорск (Украина).

### Объект исследования и входные данные

Вольногорский горно-металлургический комбинат (ВГМК) разрабатывает Малышевское месторождение ильменит-рутил-цирконовых песков. Добыча и обогащение руды до циркониевого концентрата служит первой ступенью получения циркония для потребностей ядерной энергетики Украины. Всего из стационарных источников комбината в атмосферу попадают 16 загрязняющих веществ. Выбросы в атмосферу являются основным негативным фактором производства [1 - 4].

В качестве входных данных для изучения экологической ситуации в г. Вольногорск и идентификации возможного источника загрязнения были использованы результаты замеров воздуха, взятые в 36 точках города на протяжении 2004 – 2007 гг., по пяти основным загрязняющим веществам ( $\text{Cl}_2$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{SO}_2$  и  $\text{CCl}_2\text{O}$ ).

### Метод рецепторного моделирования

Модели рецепторного моделирования (Receptor Modeling) представляют собой методы [5 - 7], которые используют химические и физические характеристики газов и частиц, измеренные на источнике и рецепторе для идентификации присутствия и определения вклада источника в концентрацию на рецепторе.

Одним из таких методов является метод факторного анализа – PMF (Positive matrix factorization), который применяется для выявления основных источников загрязнения для г. Вольногорск Днепропетровской области. Происходит разложение матрицы данных об образце какого-либо вещества на две матрицы: вклады фактора и профили фактора, которые затем должны быть аналитически интерпретированы, для того чтобы сделать выводы о том, какие типы источников представлены, используя информацию об измеренных профилях источников, анализ направления ветра, и т.д.

Исходными данными для проведения вычислений являются концентрации веществ или элементов, содержащихся в исследуемых образцах. Основное уравнение (1) для  $m$  химических веществ в  $n$  образцах от вклада  $p$  независимых источников может быть представлено в следующем виде:

$$x_{ij} = \sum_p g_{ip} f_{pj} + e_{ij}, \quad (1)$$

где  $x_{ij}$  – измеренная концентрация  $j$ -го компонента в  $i$ -м образце;

$f_{pj}$  – концентрация  $j$ -го компонента в веществе, испускаемом  $p$ -м источником;

$g_{ip}$  – вклад  $p$ -го источника в  $i$ -й образец;

$e_{ij}$  – погрешность при вычислении.

PMF существенно отличается от других методов факторного анализа, использующих сингулярное разложение матрицы. В PMF применяется метод наименьших квадратов для минимизации объектной функции  $Q$  (2), которая имеет вид

$$Q = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \left[ \frac{x_{ij} - \sum_{p=1}^p g_{ip} f_{pj}}{s_{ij}} \right]^2, \quad (2)$$

где  $s_{ij}$  – оценка ошибки  $j$ -й химической компоненты в  $i$ -м образце.

Проблема состоит в минимизации функции  $Q$  относительно  $g_{ip}$  и  $f_{pj}$  с учетом ограничений на эти переменные, учитывающие их неотрицательность. То есть профили источников и их вклады в образцы выбираются так, чтобы минимизировать сумму всех остатков  $e_{ij}$ . Для решения этой проблемы разработано несколько подходов [8].

Метод РМФ характеризуется следующими свойствами:

- позволяет определить число источников загрязнения, их характеристики и вклад каждого источника в образец, в котором зарегистрировано загрязнение;
- требует определенной подготовительной работы по определению погрешности измерений и недостающих данных;
- не гарантирует однозначного решения, поскольку сложной проблемой является вопрос о числе источников загрязнения.

Представляет интерес программа РМФ v3.0.2.2, алгоритм которой изложен в [9]. Вышеупомянутый алгоритм не решает вопроса о месте локализации источников загрязнения окружающей среды. Составной частью этого подхода является программа HYSPLIT, которая используется для расчета траекторий распространения воздушных масс, переносящих загрязнения.

### Метод обратных траекторий

Анализ обратных траекторий переноса воздушных масс или воздушной частицы используется при переносе загрязняющих веществ. Согласно этому методу строятся обратные траектории переноса воздушных масс (или частицы) на различных уровнях в атмосфере для определенных периодов наблюдения. Под траекторией понимают набор последовательных положений воздушной частицы за некоторый интервал времени. Построение обратных траекторий воздушных масс позволяет определить, откуда пришла (придет) частица в данный район. Для этого траектория откладывается от заданной точки (пункта прогноза) против воздушного потока (способ обратного переноса) [10].

Данный метод находит свое применение не только в метеорологии, но и при изучении перемещения воздушных масс веществами, загрязняющими атмосферу, позволяя определить локализацию основных источников загрязнения. Благодаря анализу обратного переноса воздушных масс и концентрации загрязняющих веществ на исследуемой территории удалось определить предполагаемый источник загрязнения для г. Вольногорск.

Для изучения пространственного распространения загрязняющих веществ использовалась программа HYSPLIT-4 (Hybride Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectories) [11].

### Идентификация источника загрязнения

Обработка данных (результаты замеров воздуха за период 2005 – 2007 гг. по пяти основным загрязняющим веществам) производилась программой РМФ v3.0.2.2. В результате работы были выявлены основные загрязняющие вещества, наблюдаемые в зоне исследований:  $Cl_2$  (среднесуточное ПДК – 0,03 мг/м<sup>3</sup>, 3-й класс опасности),  $HCl$  (среднесуточное ПДК – 0,2, 2-й класс опасности),  $NO_2$  (среднесуточное ПДК – 0,04, 2-й класс опасности).

Были построены карты концентраций и рассеивания основных загрязняющих веществ ( $\text{Cl}_2$ ,  $\text{HCl}$  и  $\text{NO}_2$ ) в г. Вольногорск в 2004 – 2007 гг., выявлены основные очаги накопления загрязняющих веществ, влияющих на ухудшение экологической обстановки в городе. Основное негативное влияние на экологическую ситуацию в городе оказывает  $\text{HCl}$ . В связи с этим для дальнейшей работы по определению источника загрязнения выбран  $\text{HCl}$  как основное загрязняющее вещество и данные замеров 2005 года, так как в этот год были получены максимальные концентрации. Согласно полученным картам рассеивания, загрязнение воздуха  $\text{HCl}$  происходило в 2005 г. в районе комбината, в южной и юго-западной части города. Идентификация возможного источника загрязнения в г. Вольногорск выполнялась с помощью построения прямых и обратных траекторий переноса воздушных масс с использованием метеорологической программы HYSPLIT.

Территория города ограничена координатами: 48.4 – 48.6 северной широты (с.ш.) и 33.4 – 34.2 восточной долготы (в.д.). Для построения траекторий задавались географические координаты ВГМК. Прямые и обратные траектории движения воздушных масс рассчитывались для 2004 – 2007 гг. с продолжительностью 8 ч на высотах 25, 50 и 100 м. В результате обработки данных выделены наиболее часто встречающиеся типы траекторий с учетом их направления и длины.

Установлено, что в данном районе в основном преобладает восточный и северо-восточный занос воздушных масс летом и осенью, а зимой и весной – юго-восточный и юго-западный.

Траектории, показанные на рис. 1, 2, характерны для летнего и осеннего периодов соответственно. Расчеты выполнялись при следующих параметрах: метеорологические данные – GDAS (Global Data Assimilation System), время работы ВГМК – 8 ч, координаты источника – 48.49 с.ш. и 34.03 в.д., высота траектории – 50 м. Загрязнение распространяется от предприятия на юго-запад в сторону жилой части города.

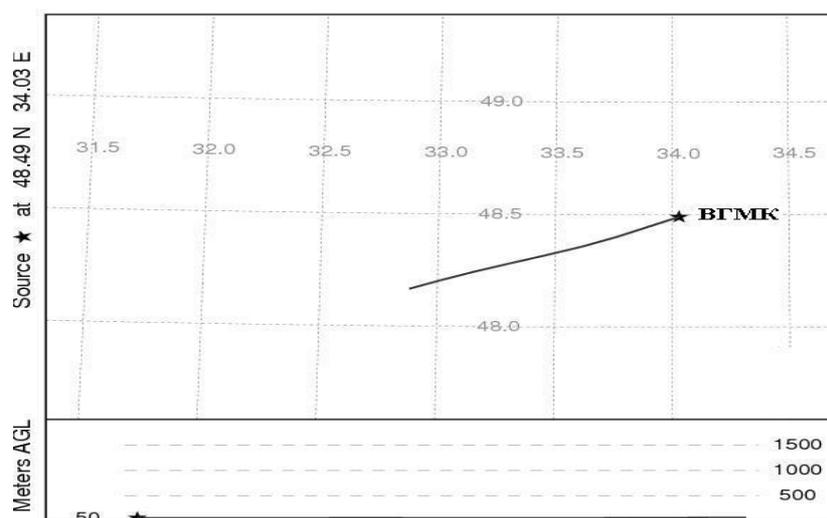


Рис. 1. Пример прямой траектории движения воздушных масс от ВГМК, характерной для лета 2005 г. на высоте 50 м

Для этих же траекторий были получены карты концентрации загрязняющих веществ и распространения частиц в воздухе. На рис. 3, 4, в частности, ситуация моделировалась для  $\text{HCl}$ . Дисперсионная модель HYSPLIT запускалась при следующих параметрах: метеорологические данные – GDAS, время выброса – 8 ч, начальная дата запуска – 1 августа 2005 г., координаты источника – 48.49 с.ш. и 34.03 в.д., высота трубы источника – 20 м.

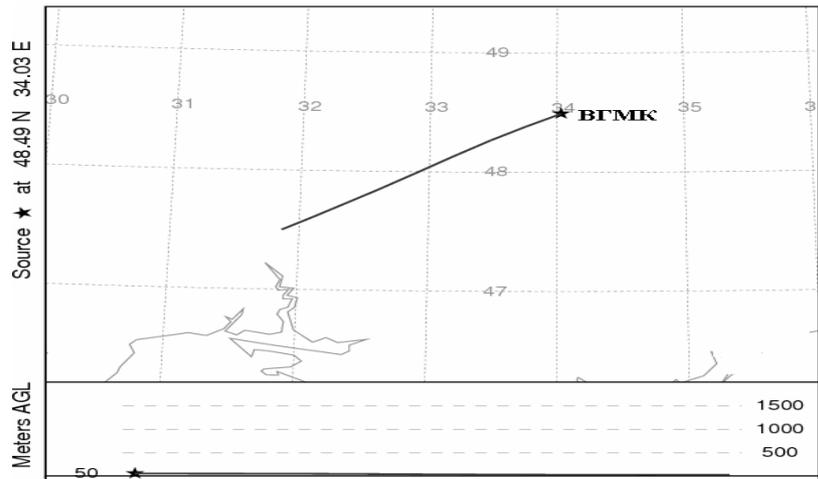


Рис. 2. Пример прямой траектории движения воздушных масс от ВГМК, характерной для осени 2005 г. на высоте 50 м

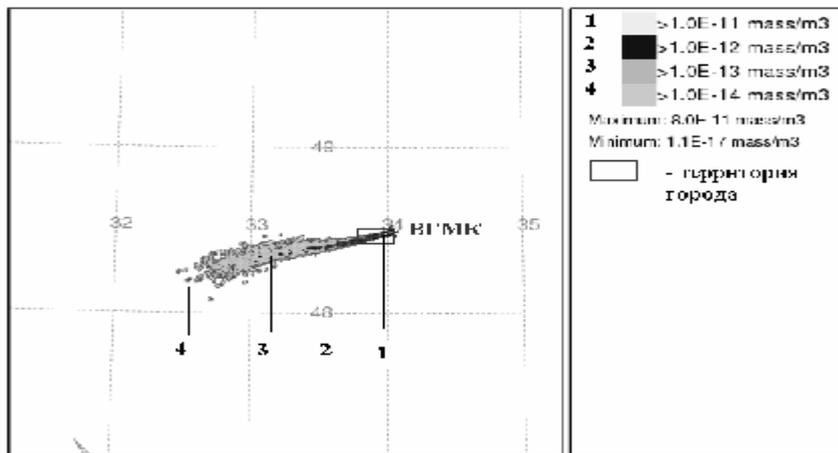


Рис. 3. Концентрация HCl на территории г. Вольногорск и области за 8 ч работы ВГМК

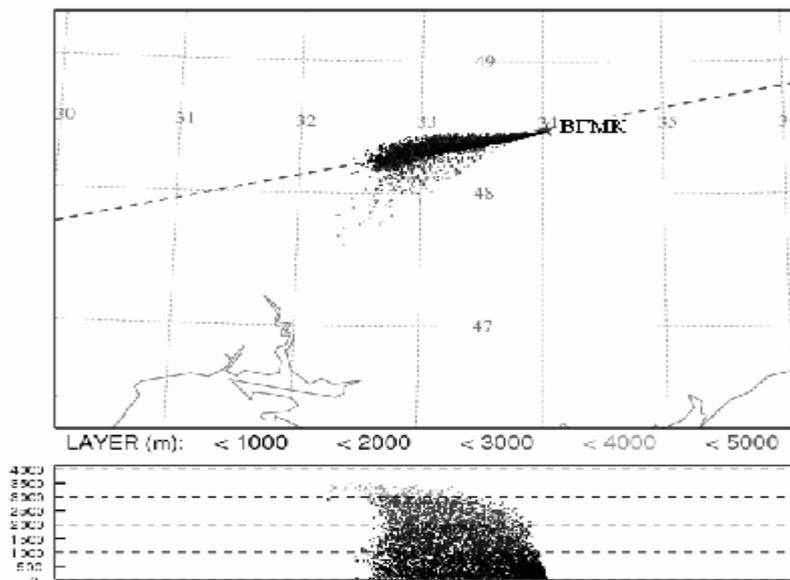


Рис. 4. Распространение HCl в воздухе на территории г. Вольногорск и области за 8 ч работы ВГМК на высоте до 3000 м

Для того чтобы определить пути заноса воздушных масс на территорию города, были построены обратные траектории. Территория города рассматривалась как площадь, ограниченная координатами 48.46 – 48.50 с.ш. и 33.98 – 34.05 в.д. Моделировалась пространственная сетка территории города с шагом 0.01 по широте и долготе. Строились обратные траектории для каждой точки для периода лето - осень 2005 г.

В результате обработки данных, полученных за этот период, выделены часто встречающиеся обратные траектории движения воздушных масс, которые показывают, что перенос загрязняющих веществ, выявленных в замерах воздуха в период 2004 – 2007 гг., происходил летом и осенью в сторону жилых кварталов города.

На рис. 5 представлена обратная траектория движения воздушных масс осенью 2005 г.: задана пространственная сетка города, высота траектории – 1 м.



Рис. 5. Обратная траектория движения воздушных масс осенью 2005 г. на высоте 1 м

В результате применения программы HYSPLIT были получены прямые и обратные траектории движения воздуха в районе деятельности ВГМК, показывающие направление переноса загрязняющих веществ, а также карты концентраций основных примесей после выброса в атмосферу.

### Выводы

В данной работе были выделены основные загрязняющие вещества, влияющие на экологическую ситуацию в г. Вольногорск, и проведен анализ их распространения в регионе с использованием обратных траекторий перемещения воздушных масс. Это позволило идентифицировать источник загрязнения и подтвердить факт того, что горно-металлургический комбинат является основным источником загрязнения для г. Вольногорск.

Таким образом, предложенный подход позволяет идентифицировать источник загрязнения по проведенным измерениям концентрации загрязнителей и анализу движения воздушных масс в районе исследования.

## ІДЕНТИФІКАЦІЯ ДЖЕРЕЛА ВИКИДІВ ЗА ДОПОМОГОЮ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ПОШИРЕННЯ ЗАБРУДНЕННЯ І ФАКТОРНОГО АНАЛІЗУ

**М.Ф. Кожевнікова, В.В. Левенець, К.А. Мець, І.М. Неклюдов, І.Л. Ролік**

Надано аналіз поширення забруднюючих речовин в атмосфері в районі розташування підприємства цирконієвого циклу в Україні. Розроблено методику обробки даних з виявлення джерел забруднення. Ідентифіковано джерело забруднення за проведеними вимірами концентрації забруднювачів та аналізу руху повітряних мас в м. Вільногорськ Дніпропетровської області (Україна). Отримано карти траєкторій повітряних потоків і розподілу у повітрі основних забруднюючих речовин на досліджуваній території.

## EMISSION SOURCE IDENTIFICATION by means of POLLUTION DISTRIBUTION MODELLING and FACTOR ANALYSIS

**M. Kozhevnikova, V. Levenets, K. Mets, I. Neklyudov, I. Rolik**

The contaminants distribution in the atmosphere near the zirconium cycle enterprise in the Ukraine has been analyzed. The data processing method for the pollution sources identification was developed. On the basis of the measured pollutant concentrations and air masses motion analysis the contamination source in the Vol'nogorsk city of the Dnepropetrovsk region (the Ukraine) has been identified. The airflow trajectories maps and distribution of basic contaminants in the air of the territory under examination were obtained.

### Список использованных источников

1. Ажажа В.М. Экологическая характеристика производства циркония, его сплавов и проката для ядерного топливного цикла Украины / В.М. Ажажа [и др.] // Экология и промышленность: науч.-производств. журн. - 2007. - № 4. - С. 44 - 50.
2. Левенец В.В. Оценка риска при воздействии выбросов в атмосферу Вольногорского горно-металлургического комбината / В.В. Левенец, И.Л. Ролік, К.А. Мець // Экология и промышленность: науч.-производств. журн. - 2009. - № 3. - С. 83 - 89.
3. Левенец В.В. Метод выражения специфических и неспецифических ингаляционных рисков в единых показателях / В.В. Левенец, И.Л. Ролік // Вестник НТУ «ХПИ». - Харьков: НТУ «ХПИ», 2010. - № 69. - С. 78 - 83.
4. Кожевникова М.Ф. Программная реализация метода оценки риска от загрязнения атмосферного воздуха выбросами химического производства / М.Ф. Кожевникова, В.В. Левенец, И.Л. Ролік // Вестник НТУ «ХПИ». - Харьков: НТУ «ХПИ», 2009. - № 24. - С. 164 - 171.
5. Нопке Р.К. Recent developments in receptor modeling / Р.К. Нопке // Journal of Chemometrics. - V. 17. - P. 255 - 265.
6. Нопке Р.К. Receptor Modeling in Environmental Chemistry / Р.К. Нопке. - Wiley: New York, 1985. - P. 502.
7. Нопке Р.К. Receptor Modeling for Air Quality Management / Р.К. Нопке. - Elsevier: Amsterdam, 1991. - P. 485.
8. Paatero P. The multilinear engine - a table-driven least squares program for solving multilinear problems, including the n-way parallel factor analysis model / P. Paatero // J. Comput. Graph. Stat. - 1999. - V. 8. - P. 854 - 888.
9. Paatero P. Least squares formulation of robust, nonnegative factor analysis / P. Paatero // Chemom. Intell. Lab. Syst. - 1997. - V. 37. - P. 23 - 35.
10. Дашко Н.А. Курс лекций по синоптической метеорологии / Н.А. Дашко. - Владивосток: ДВГУ, 2005. - 120 с.
11. Draxler R.R. Description of the HYSPLIT-4 Modeling System / R.R. Draxler, G.D. Hess // Silver Spring: Air resources Laboratory, NOAA Technical Memorandum ERL ARL-224/ - 1997. - P. 1 - 22.

Надійшла до редакції 20.08.2013 р.