

ПЕРЕДЕРИЙ ОЛЕСЯ АЛЕКСАНДРОВНА

**Автоматизация расчета концентрации загрязняющих веществ в атмосфере
с учетом фотохимических трансформаций**

Автореферат

диссертации на соискание академической степени магистра
техники и технологий по специальности
6N0704 – Вычислительная техника и программное обеспечение

Республика Казахстан
г. Усть-Каменогорск, 2011

Работа выполнена в Восточно-Казахстанском государственном техническом университете им. Д. Серикбаева

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
Турганбаев Е.М.

Официальный оппонент: кандидат технических наук,
доцент кафедры Информатика
ВКГУ им. С. Аманжолова,
Рахимжанова Г.Б.

Защита состоится 26 января 2010г. в 14-00 на заседании государственной аттестационной комиссии при Восточно-Казахстанском государственном техническом университете им. Д. Серикбаева по адресу: 070004, г. Усть-Каменогорск, ул. Серикбаева 19, аудитория ГЗ-322

Автореферат разослан «26» декабря 2010 г

Секретарь
ГАК

Денисова Н.Ф.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. Одной из важнейших проблем современности является охрана окружающей среды от отрицательного антропогенного воздействия. От правильного и своевременного решения данного вопроса зависят здоровье и благосостояние людей. Самый ощутимый вклад в загрязнение окружающей среды вносят предприятия химической, энергетической промышленности, а также предприятия цветной металлургии.

Город Усть-Каменогорск представляет собой уникальную урбанизированную систему, перенасыщенную промышленными предприятиями самой различной техногенной ориентации. В результате многолетнего комплексного воздействия антропогенных факторов состояние окружающей среды г. Усть-Каменогорска значительно изменено.

При индустриальных выбросах примесей происходит ряд сложных химических и фотохимических реакций, в результате которых образуются новые, еще более токсичные, вещества, например, кислоты, что приводит к выпадению кислотных дождей. В соответствии с вышесказанным актуальной является разработка системы автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, использующего информационные данные региональной системы мониторинга атмосферного воздуха, аппарат нечетких множеств и нечеткого вывода, ГИС-технологии.

Объектом исследования является атмосферный воздух промышленного города, а также источники его загрязнения.

Предметом исследования является автоматизированная система мониторинга загрязнения атмосферного воздуха промышленного города.

Цель диссертационной работы: разработка системы автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, для повышения эффективности мониторинга загрязнения атмосферного воздуха промышленного города и принятия решений, связанных с управлением качества состояния атмосферного воздуха.

Для достижения указанной цели в работе сформулированы следующие **задачи:**

- осуществить анализ современного состояния использования информационных технологий в экологическом мониторинге;
- разработать математическую модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций;
- осуществить визуализацию результатов моделирования с использованием ГИС-технологий;
- разработать базу нечетких продукционных правил для определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях;
- разработать систему автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом

фотохимических трансформаций, математическое обеспечение которой включает в себя модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, базу нечетких продукционных правил для определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях, средства ГИС-технологий для визуализации результатов моделирования.

Методы исследования. При решении поставленных задач в работе использованы: аппарат нечетких множеств и нечеткого вывода; математическая модель переноса соединений серы, азота, углерода; численные методы; средства объектно-ориентированного программирования; геоинформационные технологии.

Научные положения, выносимые на защиту, и их новизна заключаются в разработке системы автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха, учитывающей фотохимические трансформации веществ в атмосфере:

- модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха, учитывающая фотохимические трансформации соединений серы, азота, углерода;
- база нечетких продукционных правил определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях, в зависимости от максимальной концентрации загрязняющих веществ в данный момент времени (определяемой по инженерным расчетам) и скорости ветра;
- система автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, математическое обеспечение которой включает в себя модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, базу нечетких продукционных правил для определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях, средства ГИС-технологий для визуализации результатов моделирования.

Практическая ценность работы заключается в том, что предложенные результаты работы могут быть использованы для прогноза загрязнения атмосферного воздуха субъектами экологического мониторинга.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на I Всероссийской конференции молодых ученых с международным участием «Актуальные проблемы науки и техники», г. Уфа, 2009 г.; VIII Всероссийской НПК студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием «Молодежь и современные информационные технологии», г. Томск, 2010 г.; X Республиканской научно-технической конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых ученых «Творчество молодых - инновационному развитию Казахстана», г. Усть-Каменогорск, 2010 г.

Публикации. По теме диссертации опубликованы 3 научные статьи:

- «Использование ГИС-технологий при разработке информационной системы мониторинга загрязнений атмосферного воздуха», материалы X Республиканской научно-технической конференции студентов, магистрантов, аспирантов и молодых ученых «Творчество молодых - инновационному развитию Казахстана», г. Усть-Каменогорск, 2010 г.;
- «Информационное обеспечение ИС экологического мониторинга загрязнения атмосферного воздуха», материалы I Всероссийской конференции молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники» г. Уфа, 2009 г.;
- «Информационная система мониторинга атмосферного загрязнения», материалы VIII Всероссийская научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием «Молодежь и современные информационные технологии», г. Томск, 2010 г.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованных источников и приложений. Основное содержание работы изложено на 93 страницах машинописного текста, иллюстрированного таблицами и рисунками.

Ключевые слова: Предельно-допустимая концентрация, пункт наблюдения за загрязнением, загрязняющее вещество, мониторинг атмосферного воздуха, перенос примесей, кинетика химических реакций, фотохимические трансформации, экология, концентрация, неблагоприятные метеорологические условия, выброс.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** дается общая характеристика работы и обосновывается ее актуальность.

В **первой главе** рассмотрено современное состояние использования информационных технологий в экологическом мониторинге, описано, какие работы по изучению данных состояния загрязнения воздуха выполнялись в рамках региональной экологической программы «Охраны окружающей среды ВКО на 2005-2007 годы», кратко описана комплексная экологическая Программа по оздоровлению окружающей среды и населения г. Усть-Каменогорска на 2006-2015 годы. Также исследована экологическая обстановка в регионе (по Восточно-Казахстанской области и г. Усть-Каменогорск), приведена обзорная информация по региональному экологическому мониторингу Восточно-Казахстанской области.

Во **второй главе** приведены этапы разработки следующих подсистем:

- подсистемы организации сбора и хранения данных;
- подсистемы оценки НМУ;
- подсистемы прогноза загрязнения с учетом фотохимических трансформаций.

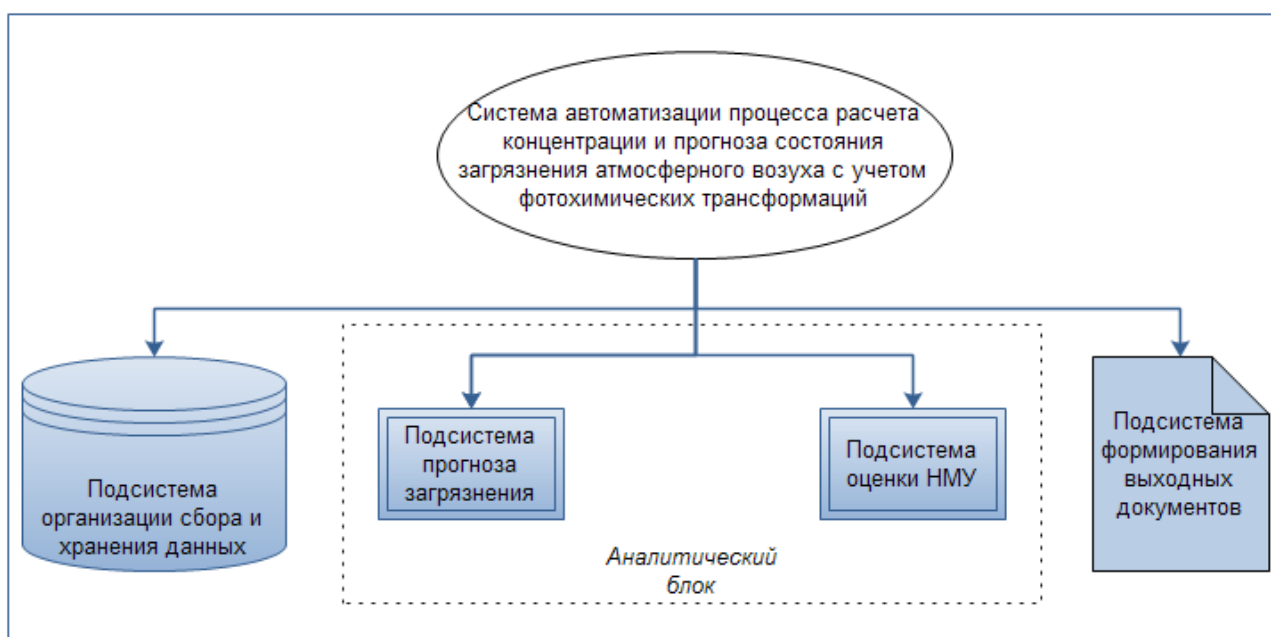


Рисунок 1 – Информационный блок системы расчета концентрации загрязняющих веществ с учетом фотохимических трансформаций

При описании **подсистемы организации сбора и хранения данных** сформулирована следующая инфологическая модель:

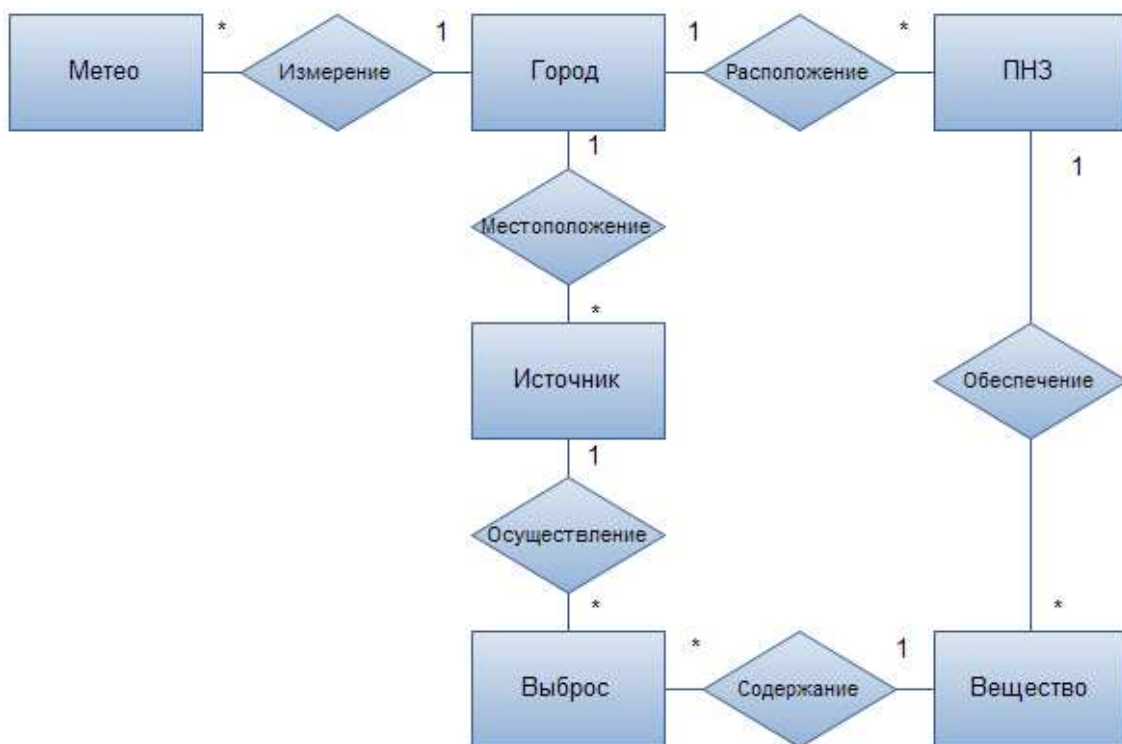


Рисунок 2 – Инфологическая модель

Разработана логическая модель данных, служащая основой для физического проектирования.

Подсистема оценки НМУ служит для определения категории (степени) штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условий.

В зависимости от ожидаемого уровня загрязнения составляются три степени штормовых предупреждений о НМУ:

- I степень, которая передается, если ожидается превышения концентрации одного или нескольких контролируемых веществ выше ПДК;
- II степень, которая передается, если ожидается превышения концентрации одного или нескольких веществ выше 3 ПДК;
- III степень, которая передается, если ожидается превышения концентрации одного или нескольких веществ выше 5 ПДК.

Подсистема оценки НМУ состоит из трех частей (представлено на рисунке 3):

- определение максимального значения приземной концентрации загрязняющего вещества, относящееся к 20 – 30 минутному интервалу от указанного момента времени в соответствии с «Методикой расчета концентраций вредных веществ в атмосферном воздухе от выбросов предприятий»;
- определение силы ветра;
- определение категории штормового предупреждения о НМУ по результатам предыдущих двух частей с использованием основ нечеткой логики.



Рисунок 3 – Подсистема оценки НМУ

Для формирования правил выявления степени штормового предупреждения о НМУ используются две входные и одна выходная лингвистические переменные. В качестве первой входной переменной используется лингвистическая переменная «Превышение ПДК», которая имеет следующее терм-множество: {«нет превышения», «малое превышение», «среднее превышение», «высокое превышение»}. В качестве второй лингвистической переменной используется переменная «Сила ветра», имеющая терм-множество: {«слабая», «средняя», «сильная»}. Выходной переменной является лингвистическая переменная «Категория НМУ», которая имеет терм-множество {«Без категории», «1 степень», «2 степень», «3 степень»}.

X - Превышение ПДК;
Y - Сила ветра

Сильная	без категории	1 степень	1 степень	2 степень
Средняя	без категории	1 степень	2 степень	3 степень
Слабая	без категории	2 степень	3 степень	3 степень
	0 Нет	Малое	Среднее	Высокое X

Рисунок 4 – Матрица определения категории штормового предупреждения

Нечеткая база правил реализована с использованием специального набора инструментов для построения и анализа нечётких множеств под названием Fuzzy Logic Toolbox, расширяющего функциональность пакета MATLAB от компании Mathworks.

Подсистема прогноза загрязнения с учетом фотохимических трансформаций. Один из существующих подходов при моделировании распространения загрязняющих веществ заключается в том, что рассматривается уравнение переноса примеси. Компоненты скорости ветра, участвующие в уравнении переноса примеси, являются входными параметрами и определяются как постоянные величины.

Рассмотрена следующая модель:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div} \vec{u}c + Bc = F + \Delta c, \quad (1)$$

где c – концентрация загрязняющего вещества;

t – время;

B – оператор трансформации;

F – функция, описывающая источники примесей;

Δ оператор описывающийся формулой:

$$\Delta = \frac{\partial}{\partial x} \mu_1 \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_2 \frac{\partial}{\partial y}, \quad (2)$$

в котором μ_1, μ_2 – горизонтальные коэффициенты турбулентности,

а $\text{div} \vec{u}$ определяется следующим равенством:

$$\text{div} \vec{u} = u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y}, \quad (3)$$

где u, v – компоненты вектора скорости ветра в направлениях декартовых координат x и y .

Краевые условия:

$$c = c_0 \text{ при } x=0, X, y=0, Y; \quad (4)$$

Начальные условия при $t=0$ задаются по данным измерений и относятся к числу параметров настройки рассматриваемой модели.

Для реализации модели выбран метод расщепления. Схема аппроксимации модели по времени, исходя из принципов расщепления «по физическим процессам», на каждом временном шаге делится на следующие основные этапы:

- перенос субстанций вдоль траектории и турбулентный обмен;
- процесс фотохимических трансформаций.

Решение уравнения переноса субстанций вдоль траекторий и турбулентного обмена служит начальным условием для задачи процесса фотохимических трансформаций.

Перенос субстанции вдоль траектории и турбулентный обмен:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{v}c = F, \quad (5)$$

Краевые условия:

$$c = c_0, \text{ при } x=0, x=X, \quad (6)$$

$$c = c_0, \text{ при } y=0, y=Y, \quad (7)$$

Процесс фотохимической трансформации:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + Bc = 0, \quad (8)$$

Система уравнений решается при следующих краевых условиях:

$$c = c_0, \text{ при } x=0, x=X, \quad (9)$$

$$c = c_0, \text{ при } y=0, y=Y, \quad (10)$$

Для определения поля концентрации уточняется оператор B , который определяется кинетикой химических реакций для соединений четырех газовых компонент: диоксида серы (SO_2), диоксида азота (NO_2), оксида азота (NO) и оксида углерода (CO). Решена система уравнений, состоящая из 22 уравнений относительно концентраций газовых компонент.

Численная реализация модели осуществлена конечно-разностным методом с использованием схем второго порядка точности по времени и по пространству. При решении системы уравнений кинетики использовалась модификация полунявной двухшаговой схемы с хорошими стабилизирующими свойствами, совмещающей правильное качественное поведение на квазистационарных режимах и точность второго порядка для существенно нестационарных условий.

Третья глава посвящена описанию назначения программного средства, требований по функционированию, а также описанию функциональных возможностей и последовательности действий при работе.

Система автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций реализована в среде Borland Delphi. При разработке баз данных были использованы СУБД MS Access, dBase, Visual FoxPro. Для экспорта и отображения данных был использован MS Excel. Для визуализации распространения примесей используется приложение MapInfo. Работа с нечеткой логики реализована с помощью библиотек программного комплекса MATLAB. Схема межпрограммного взаимодействия приведена на рисунке 5:

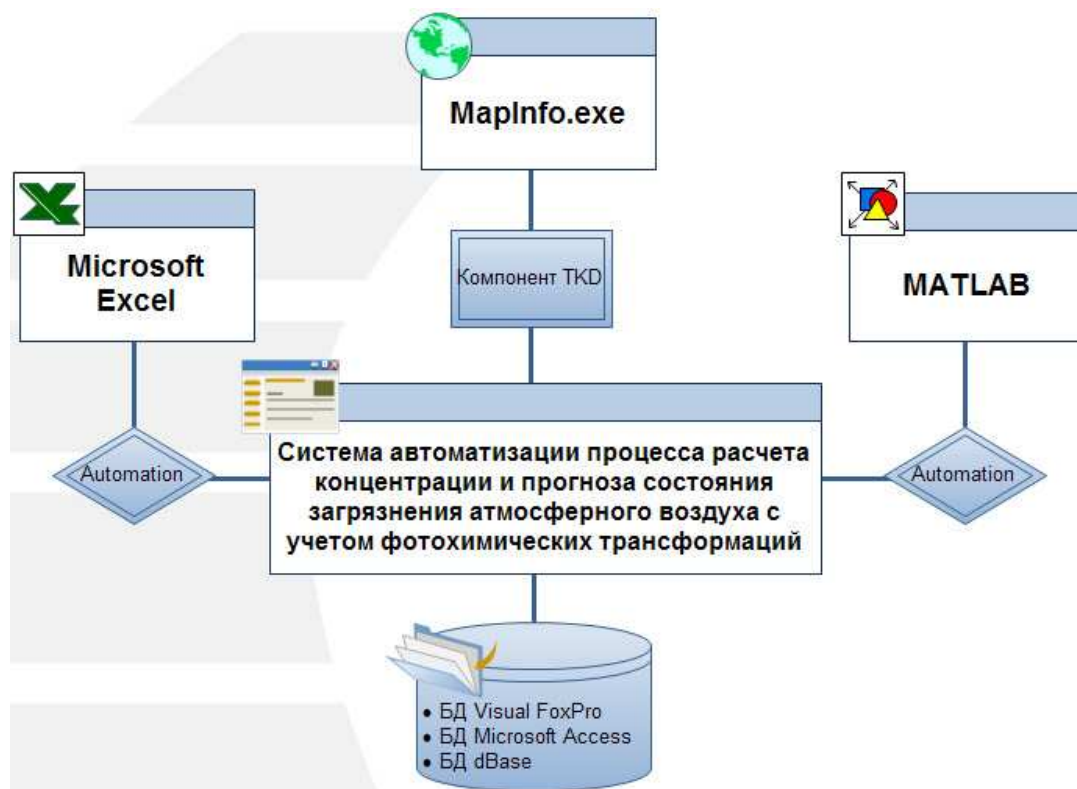


Рисунок 5 – Схема межпрограммного взаимодействия

С помощью системы автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций можно рассчитать значения концентраций, учитывая фотохимические трансформации выбрасываемых загрязняющих веществ в каждой точке карты; выдать прогноз по штормовому предупреждению о НМУ, определив максимальную концентрацию, достигаемую от каждого источника и от всех источников в целом; построить поля концентраций, которые наглядно отображают области на карте, в которых приземная концентрация близка или превышает предельно допустимую концентрацию.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В магистерской диссертации проведен анализ современного состояния использования информационных технологий в экологическом мониторинге.

Разработана математическая модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций.

Разработана база нечетких продукционных правил для определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях.

Разработана система автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, математическое обеспечение которой включает в себя модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, базу нечетких продукционных правил для определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях, средства ГИС-технологий для визуализации результатов моделирования.

Оценка полноты решений поставленных задач. Поставленная цель работы достигнута. Задачи решены полностью.

Система автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций позволяет сократить материальные, трудовые, временные ресурсы, затрачиваемые при расчетах рассеивания различной степени сложности. С его помощью можно рассчитать значения концентраций, учитывая фотохимические трансформации выбрасываемых загрязняющих веществ в каждой точке карты; выдать прогноз по штормовому предупреждению о НМУ, определив максимальную концентрацию, достигаемую от каждого источника и от всех источников в целом; построить поля концентраций, которые наглядно отображают области на карте, в которых приземная концентрация близка или превышает предельно допустимую концентрацию.

РЕЗЮМЕ

Олеся Александровна Передерий

Тема диссертации: «Автоматизация расчета концентрации загрязняющих веществ в атмосфере с учетом фотохимических трансформаций».

Ключевые слова: предельно-допустимая концентрация, пункт наблюдения за загрязнением, загрязняющее вещество, мониторинг атмосферного воздуха, перенос примесей, кинетика химических реакций, фотохимические трансформации, экология, концентрация, неблагоприятные метеорологические условия, выброс.

Цель диссертационной работы: разработка системы автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, для повышения эффективности мониторинга загрязнения атмосферного воздуха промышленного города и принятия решений, связанных с управлением качества состояния атмосферного воздуха.

Объектом исследования является атмосферный воздух промышленного города, а также источники его загрязнения.

Предметом исследования является автоматизированная система мониторинга загрязнения атмосферного воздуха промышленного города.

Методы исследования. При решении поставленных задач в работе использованы аппарат нечетких множеств и нечеткого вывода; математическая модель переноса соединений серы, азота, углерода; численные методы; средства объектно-ориентированного программирования; геоинформационные технологии.

Научные положения, выносимые на защиту:

- модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха, учитывающая фотохимические трансформации соединений серы, азота, углерода;
- база нечетких продукционных правил определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях, в зависимости от максимальной концентрации загрязняющих веществ в данный момент времени и скорости ветра;
- система автоматизации процесса расчета концентрации и прогноза состояния загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, математическое обеспечение которой включает в себя модель прогноза загрязнения атмосферного воздуха с учетом фотохимических трансформаций, базу нечетких продукционных правил для определения категории штормового предупреждения о неблагоприятных метеорологических условиях, средства ГИС-технологий для визуализации результатов моделирования.

Практическая ценность работы заключается в том, что предложенные результаты работы могут быть использованы для прогноза загрязнения атмосферного воздуха субъектами экологического мониторинга.

ТҮЙІНДЕМЕ

Олеся Александровна Передерий

Диссертация тақырыбы: «Фотохимиялық трансформацияны есепке ала отырып ауаны ластаушы заттар шоғырлануын есептеуді автоматтандыру».

Негізгі сөздер: шекті-мүмкіндікті шоғырлану, ластануды бақылау пункті, ластаушы заттар, атмосфералық ауа мониторингі, қоспаларды тасымалдау, химиялық реакциялар кинетикасы, фотохимиялық трансформациялар, экология, шоғырлану, жағымсыз метеорологиялық жағдайлар, шығарындылар.

Диссертациялық жұмыс мақсаты: шоғырлану есебінің үрдісін автоматтандыру жүйесін және фотохимиялық трансформацияны есепке ала отырып атмосфералық ауаның ластануы жағдайын болжауды өндірістік қаладағы атмосфералық ауа ластануы мониторингін тиімді жақсарту және атмосфералық ауа жағдайының сапасын басқарумен байланысты шешім қабылдауды жете зерттеу.

Зерттеу нысаны болып өндірістік қаладағы атмосфералық ауа және оны ластау көздері табылады.

Зерттеу пәні болып өндірістік қаладағы атмосфералық ауаны ластаушы мониторингінің автоматты жүйесі табылады.

Зерттеу әдісі. Жұмыста көтерілген мәселелерді шешу үшін анық емес көптік және анық емес қорытынды аппараты; күкірт, азот, көмірсу қоспаларын тасымалдаудың математикалық моделі; сандық әдістер; объектілі-нысаналау бағдарламасының әдісі; геоақпараттық технологиялар қолданылды.

Қорғауға ұсынылған қағидалар:

- күкірт, азот, көмірсу қоспаларының фотохимиялық трансформациясын есепке алатын атмосфералық ауаның ластануын болжайтын модель;
- берілген уақытта ластаушы заттардың максималды шоғырлануы мен жел жылдамдығына байланысты жағымсыз метеорологиялық жағдай туралы ескерту категориясын анықтаудың анық емес өнімдік ережелер базасы;
- фотохимиялық трансформацияны есепке ала отырып, шоғырлану есебі үрдісін және атмосфералық ауаның ластануы жағдайын болжаудың автоматтандыру жүйесі, фотохимиялық трансформацияны есепке ала отырып атмосфералық ауа ластануын болжау моделін өзіне енгізетін математикалық қамтамасыз ету, жағымсыз метеорологиялық жағдайлар туралы ескерту категориясын анықтауға арналған анық емес өнімді ережелер базасы, моделдеу қорытындысын көзбен шолу үшін ГАЖ-технологиялар құралдары.

Жұмыстың тәжірибелік құндылығы ұсынылған жұмыстың қорытындыларын атмосфералық ауа ластануын болжауда экологиялық мониторинг субъектілеріне қолдануға болады.

ABSTRACT

Olessya A. Perederiy

The theme of master's thesis is automation of estimation of pollutant concentration with due account for photochemical transformation.

Keywords: maximum allowable concentration, stationary site of atmospheric air observations, air contaminant, atmospheric air monitoring, impurities transfer, kinetics of chemical reactions, photochemical transformation, ecology, adverse weather conditions, environmental discharge.

The aim of the work is to develop a system of automation of process of estimation of pollutant concentration and forecast of atmospheric air pollution with due account for photochemical transformation for increasing efficiency of atmospheric air pollution monitoring and decision-making related to the quality management of atmospheric air condition.

Object of research is the air pool of an industrial city, sources of pollution of atmospheric air. **Subject of research** is automated system of monitoring of pollution of atmospheric air of industrial city.

Research methods: An apparatus of fuzzy set and fuzzy inference; translation model for compounds of sulfur, nitrogen, carbon; means of object-oriented programming; geoinformational technologies were used in present thesis for abovementioned tasks solution.

The positions which are brought into presentation:

- forecast of atmospheric air pollution model, considering photochemical transformation of compounds of sulfur, nitrogen, carbon;
- base of fuzzy production rules for determination of the category of warning about adverse weather conditions depending of concentration of maximum polluting substances at this time and speed of wind;
- system of automation of process of estimation of pollutant concentration and forecast of atmospheric air pollution with due account for photochemical transformation, including model of forecast of atmospheric air pollution, base of fuzzy production rules to predict the category of warning about adverse weather conditions, providing of visualization of modeling results by means of geoinformational technologies.

Practical value of work. Proposed results of research can be used for forecast of atmospheric air pollution by subjects of ecological monitoring.