DOI 10.37882/2223-2966.2025.06-2.10

МОДЕЛИ РАСЧЕТА КОНЦЕНТРАЦИЙ ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В ПРИЗЕМНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

MODELS FOR CALCULATING CONCENTRATIONS OF HARMFUL SUBSTANCES IN THE SURFACE LAYER OF THE ATMOSPHERE

K. Zavitaev
O. Yagolnitzer

Summary. One of the main sources of atmospheric air pollution are combined heat and power plants and boiler heating plants that use gas or coal as the initial fuel. During the technological process of fuel combustion, several gaseous and fine-dispersed substances are produced, negatively affecting both the ecological situation of the region and the state of human health, resulting in significant risks for global environmental problems and an increase in people with chronic lung diseases. There are many models, techniques, and calculation methods with the help of which it is possible to monitor not only the behaviour of harmful substances in the atmospheric air, but also to assess the content of pollutants in the surface layer of the atmosphere, considering a variety of factors. Purpose of work: to conduct a comparative analysis of existing models, techniques, and methods of calculation of concentrations of harmful substances used to solve environmental problems, to identify the advantages and disadvantages, and based on the work done to make a proposal to consider a new automated methodology for calculating pollutants in the surface layer of the atmosphere, including machine learning tools.

Keywords: calculation methods, dispersion of harmful substances, pollutants, techniques, models, dispersion mechanisms, machine learning.

Завитаев Кирилл Витальевич
Аспирант, ФГАОУ ВО «Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»
k.zavitaev@stankin.ru
Ягольницер Ольга Владимировна
кандидат технических наук,
ФГАОУ ВО «Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»
o.yagolnicer@stankin.ru

Аннотация. Одним из основных источников загрязнения атмосферного воздуха являются теплоэлектроцентрали и котельные тепловые станции, использующие в качестве исходного топлива газ или уголь. Во время технологического процесса сжигания топлива образуется ряд газообразных и мелкодисперсных веществ, негативно влияющих как на экологическую обстановку региона, так и на состояние здоровья людей, в результате чего создаются существенные риски для возникновения глобальных экологических проблем и увеличения людей с хроническими заболеваниями легких. Существует множество моделей, методик и методов расчета, с помощью которых можно отслеживать не только поведение вредных веществ в атмосферном воздухе, но и проводить оценку содержания загрязняющих веществ в приземном слое атмосферы с учетом множества факторов. Цель работы: провести сравнительный анализ существующих моделей, методик и методов расчета концентраций вредных веществ, использующих для решения природоохранных задач, выявить достоинства и недостатки, и на основании проведенной работы сделать предложение по рассмотрению новой автоматизированной методики расчета загрязняющих веществ в приземном слое атмосферы, включающая в себя инструменты машинного обучения.

Ключевые слова: методы расчета, рассеивание вредных веществ, загрязняющие вещества, методики, модели, механизмы рассеивания, машинное обучение.

Введение

Основными загрязняющими веществами, образуемые в результате антропогенной деятельности человека, являются диоксид серы, диоксида азота, угарный газ, избыточное накопление углекислого газа, влияющее на параметрическое загрязнение и изменение климатических показателей воздуха, аэрозоли преимущественно фиброгенного действия или взвешенные частицы, а также диоксины, содержание которых в воздухе может привести к возникновению ряда серьезных заболеваний вплоть до появление злокачественных опухолей.

Следовательно, перед инженерной экологией стоит ряд очень важных задач: исследование поведения газовой струи в воздухе, содержащая в своем составе вредные вещества, образуемые в результате сжигания топлива на ТЭЦ и котельных, создание различных методик, с помощью которых можно проводить оценку уровня загрязнения атмосферного воздуха, и практическое применение методов расчета концентраций вредных веществ.

Исследование образуемых веществ

В результате сжигания топлива в топочной камере котла образуется ряд веществ, оказываемых влияние как на состояние окружающей среды, так и на здоровье человека, причем виды веществ зависят от используемого сырья. Как правило, это природный газ и в редких случаях уголь. Каменный уголь является одним из самых грязных

ископаемых и перед использованием в промышленности всегда подвергается первичной и вторичной переработкам, благодаря которой содержание серы уменьшается в разы. Несмотря на то, что уголь в современном мире используется действительно очень редко, он все равно имеет место быть на некоторых ТЭЦ из России.

Если говорить про природный газ, то не зря его называют одним из чистых видов топлива, так как при его использовании в промышленности, как минимум, не образуется диоксида серы и взвешенных частиц. Таким образом, концентрация данных веществ не нормируется.

Диоксид серы — газ без цвета с резким запахом, имеет высокую степень токсичности, при поступлении в организм человека может вызывать раздражение легких, появление кашля и насморка.

Угарный газ — при небольшом содержании в приземном слое атмосферы может вызывать удушье и головные боли.

Диоксины (бенз(а)пирен) — образуется в небольших количествах и имеет жесткие ограничения на установленные санитарно-гигиенические нормативы. Имеет накопительный эффект и в результате длительного воздействия может приводить к возникновению злокачественных опухолей, что может впоследствии привести к возникновению летального исхода.

Взвешенные частицы (PM) — образуются в результате неполного сгорания топлива, при высоких концентрация в воздухе может оказывать влияние как на легкие, так и на раздражение слизистой вместе с кожей. Наиболее часто возникающие заболевания — бронхит и астма [1, с. 734].

Оксиды азота (NO и NO_2) — имеют два основных источника образования — природный и антропогенный. Если говорить про оксид азота, то оно является неустойчивым соединением и в процессе окисления превращается в более опасный компонент, как диоксид азота, который вследствие возникновения природных явлений, таких как дождь, является основным фактором для образования азотной кислоты, которая при попадании на кожу человека может привести к возникновению серьезных последствий [2, с. 53–54].

Ориентируясь на научные исследования по негативному воздействию вредных веществ на здоровье человека, перед инженерной экологией стоит задача нормирования и разработка наиболее качественных методик, учитывающих различные механизмы рассеивания вредных веществ.

При моделировании и исследовании распространения вредных веществ по всему объему дымового облака обычно учитываются такие факторы, как источник загрязнения, метеорологические условия (температура, категория устойчивости атмосферы, турбулентность, скорость и направление движения ветра), а также химические свойства самих веществ.

Разрабатывая эффективные методики расчета и модели рассеивания вредных веществ в атмосфере, можно заниматься не только прогнозированием изменения динамики концентрации загрязняющих веществ, но и применять эффективные меры и стратегии по минимизации антропогенного воздействия на окружающую среду [3, с. 1–2].

Основные механизмы рассеивания вредных веществ и процессы, оказывающие влияние на распределение примесей в воздухе показаны на рисунке 1.

Если говорить про одни из наиболее основных факторов рассеивания вредных веществ, как инерционное турбулентное перемешивание примесей и категорию устойчивости атмосферы, то они влияют как на перенос веществ в воздухе, так и на их свойства [4, с. 13]. Например, при наиболее благоприятном классе устойчивости, когда происходит перемешивание верхних более холодных слоев воздуха с нижними и более теплыми, наблюдаются минимальные и в пределах нормы значения концентраций вредных веществ.

Наиболее особым спросом пользуется модель Гаусса, где рассеивание вредных веществ подчиняется закону нормального распределения и учитывается в двух взаимно расположенных плоскостях *y* и *z*. Причем функции рассеивания примесей напрямую зависят как от класса устойчивости атмосферы, так и от скорости и направления движения ветра, а также другими встречающимися погодными явлениями, например, облачность.

Особое внимание стоит уделить утвержденной методики расчета рассеивания вредных веществ МРР-2017, являющуюся действующей расчетной моделью для прогнозирования и исследования динамики изменения концентрации примесей. Данная модель является факельной и позволяет учитывать коэффициент рельефа местности [5, с. 44].

Например, стоит упомянуть автора [6, с. 264], который разработал математическую модель рассеивания и переноса вредных веществ, где он решал задачу распространения загрязняющих веществ от мгновенного точечного стационарного источника загрязнения атмосферы в предположении частичного поглощения вредных компонентов примесей. Для создания расчетного алгоритма и теоретического обоснования проведенного эксперимента были применены численные методы.

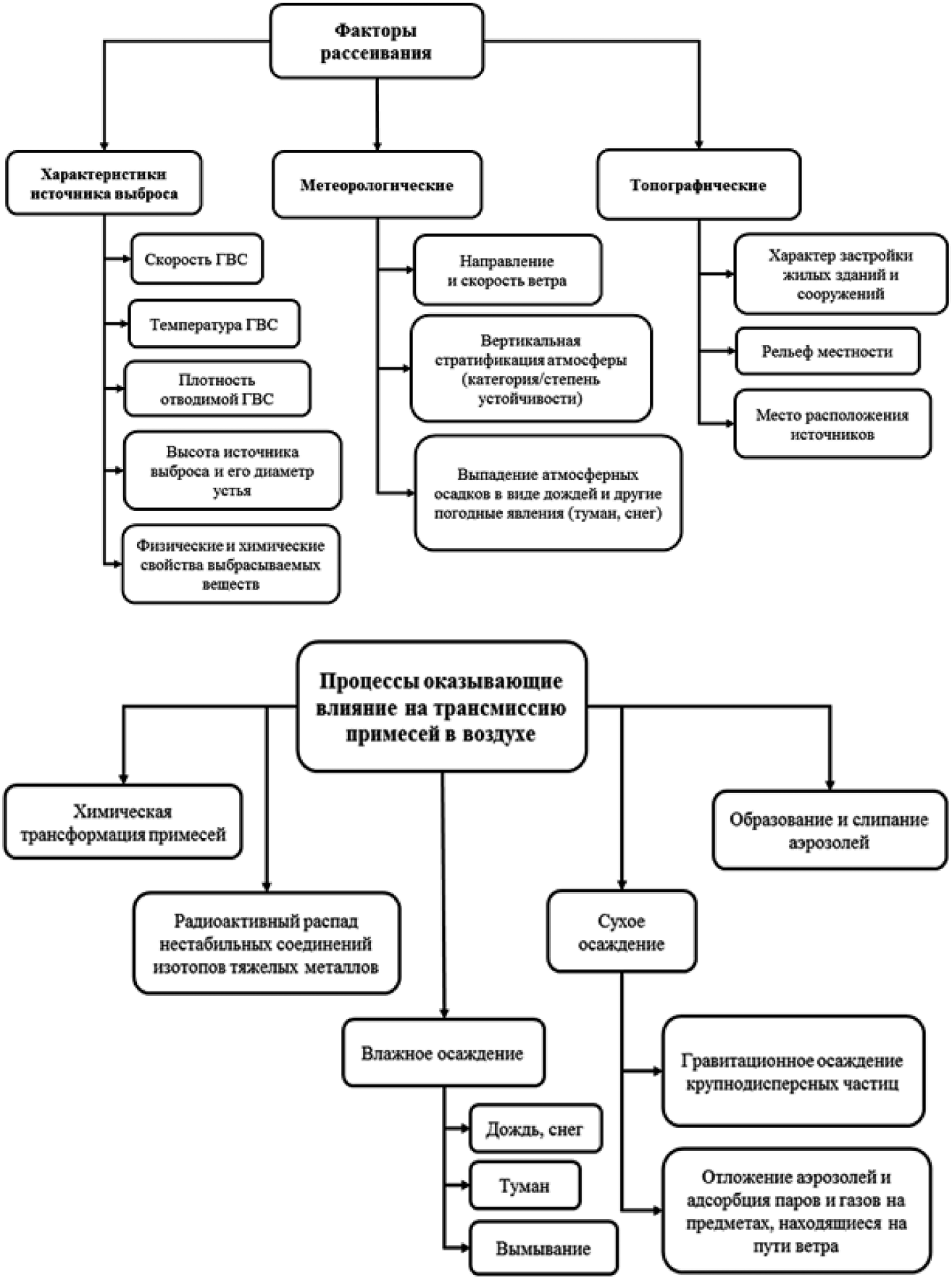

Рис. 1. Механизмы рассеивания и распространения вредных веществ в атмосфере

В данной работе мы также отдельно рассмотрим диффузионную модель Навье-Стокса, где процесс переноса примесей описан с помощью достаточно непростых уравнений диффузии, однако авторы [7, с. 1–2] для исследования аварийного или залпового выброса, который может нести за собой повышенную концентрацию веществ, использовали усредненную по Рейнольдсу вышесказанную модель для различных категорий устойчивости атмосферы, учитывая как благоприятные так и не самые подходящие погодные условия для рассеивания вредных веществ.

Ориентируясь на то, что в современном мире существует достаточно большое количество как отечественных, так и зарубежных методик, каждая из них может быть вполне рассмотрена как один из методов для проведения автоматизированного расчета и прогнозирования различных типов веществ. Например, Сысоева и Гильманова [8, с. 1028–1030] уделяют особое внимание разбору и сравнительную анализу существующих методик для оценки влияния на состояние окружающей среды в результате передвижения автотранспорта.

Ссылаясь на авторов Сысоеву и Гильманову, в данной работе будет проведен сравнительный анализ методик, моделей и методов расчета загрязняющих веществ, образуемых в результате сжигания топлива.

Материалы и методы

В качестве материалов в статье были отобраны и проанализированы отечественные и зарубежные методики расчета рассеивания загрязняющих веществ с учетом множества условий. Сравнительный анализ был проведен на основе опыта использования молодых ученых в научно-исследовательской литературе.

В данной статье используется множество методов, построенных как на основе математического моделирования, так и статистического анализа данных, где в качестве случайной величины будет выступать значение концентрации вещества.

Результаты и обсуждения

Существует множество моделей рассеивания загрязняющих веществ, описывающих их поведение атмосферном воздухе.

Применение математического моделирования, утвержденных моделей рассеивания веществ и основанных на нем программных пакетов играет существенную роль в контроле уровня загрязнения крупных промышленных городов. Такие модели, как правило, являются отличным инструментом для количественной оценки антропогенного воздействия человека [9, с. 159], а также необходимы для системы управления качеством обеспечения защиты атмосферного воздуха. Даже если посмотреть на историю создания фундаментальных исследований, то можно сказать, что каждая из моделей может вполне найти практическое применение, особенно в области прогнозирования. Поэтому выбор модели будет прежде всего зависеть от санитарно-гигиенических требований по качеству обеспечения атмосферного воздуха, которые жестко регламентируется экологическим законодательством по обеспечения безопасности воздушной среды.

На основе обзора часто встречающихся моделей рассеивания вредных веществ проведем сравнительный анализ на качество решения природоохранных задач и выявим достоинства и недостатки при проведении исследования. Результаты исследования отражены в таблице 1.

Таблица 1.

Достоинства и недостатки математических, статистических и расчетных моделей рассеивания вредных веществ в атмосфере

Типы используемых моделей	Достоинства и недостатки
Модель переноса примесей	Достоинства: • Наиболее упрощенная модель. • Используются для изучения влияния одиночных источников, выбросы которых содержат твердые частицы, переносимые на большие расстояния. • Из-за простоты модели возможна комбинация использования с другими моделями. Недостатки: • Данная модель не учитывает вторичные химические превращения, преобразования и трансформацию примесей. • Не учитывает влияние метеорологических факторов рассеивания. • Не пригодна для оценки концентрации веществ вблизи выброса от источника (на не удаленном расстоянии).
Гауссова модель	Достоинства: • Простота расчета и высокая точность оценки максимальной приземной концентрации. • Позволяет получать удовлетворительные результаты для расстояний до 20 км от источника выброса. • Учитываются метеорологические факторы (скорость ветра), вторичные превращения примесей и турбулентная диффузия выбрасываемых веществ. • Имеется возможность дополнительного усовершенствования модели (учет категории устойчивости, характера застройки местности).

Типы используемых моделей	Достоинства и недостатки
	Недостатки: • Отсутствие учета рельефа местности, характер застройки (в том числе расположение источников относительно зданий). • Из-за отсутствия некоторых топографических факторов оценка концентрации веществ вблизи источника может быть не точной.
Метод Монте-Карло	Достоинства: • Достаточно высокая точность измерения. • Возможность отслеживание траектории случайно блуждающих частиц. Недостатки: • Дают точную оценки только по одной траектории движения примесей в воздушной среде, учет нескольких траекторий дает ошибочные результаты (отклонения) и не рационален.
Модель градиентного переноса	Достоинства: • Данная модель учитывает пространственно-временной перенос примесей в воздухе. • Учитывает скорость ветра в направлении движения примеси в воздухе. • Учет турбулентной диффузии газовой смеси. • Используется функция, описывающая параметры источника выброса (высота, диаметр устья, параметры выброса ГВС). Недостатки: • Не учитывает метеорологические особенности местности. • Нет учета географических особенностей местности (неровности, рельеф местности, характер застройки сооружений).
Модель, основанная на применении уравнения Навье-Стокса (для вязкого газа)	Достоинства: • Возможность описания процесса переноса примесей на основе использования уравнений: диффузии газов и твердых аэрозолей, влажности и потенциальной температуры. Недостатки: • Сложные расчеты и долгий процесс решения громоздких математических уравнений.
Моделирование распространения вредных веществ при переменном профиле скорости	Достоинства: • Учитывает коэффициент взаимодействия исследуемой примеси с подстилающей поверхностью. • Учет скорости взаимодействия вещества с окружающей средой. • Учитываются параметры источника загрязнения. • Есть возможность отследить частичное накопление примесей.

Типы используемых моделей	Достоинства и недостатки
	Недостатки: • Сложные и громоздкие уравнения с элементами математических расчетов. Не учитывается коэффициент рельефа местности или топографические факторы рассеивания вредных веществ. • Не учитывается температура выброса, не сделан акцент на метеорологические факторы рассеивания вредных веществ за исключением скорости ветра.
Модель WRF-CFD	Достоинства: • Сочетает в себе сразу же несколько моделей, что очень удобно для отслеживания влияния различных процессов, происходящих в атмосфере, на диффузию веществ. • Отлично походит для изучения распространения вредных веществ в результате возникновения залповых выбросов. • Оценка содержания вредных веществ производится с учетом категории устойчивости атмосферы. Недостатки: • Не учитывает топографические факторы рассеивания вредных веществ (рельеф местности). • Отлично подходит для изучения динамики распространения опасных газов, но не актуальна для аэрозолей и взвешенных частиц. • Не учитывает влажность воздуха, озеленение территории и влияние жилой застройки на динамику изменения концентраций газообразных веществ.
Модель Берлянда (ОНД-86)	Достоинства: • Возможность вести расчет приземной концентрации на основе турбулентной диффузии дымового облака. • Имеется возможность вести расчет максимальных приземных концентраций при умеренно неустойчивом состоянии атмосферы. • Концентрации примесей усредняются по 20–30 минутному интервалу. • Учитывает характеристики источника загрязнения, опасную скорость ветра. • Возможность вести расчет и для горячих, и для холодных выбросов. • Методика не включает в себя громоздких решений уравнений. Недостатки: • Расчетная модель не учитывает класс вертикальной стратификации или категории устойчивости атмосферы. • Не учитывает шероховатость подстилающей поверхности (коэффициент рельефа местности). • Методика применима для расчета примесей на расстоянии не более чем 100 км от источника загрязнения.

Типы используемых моделей	Достоинства и недостатки
МРР-2017	Достоинства: • Является улучшенной версией модели Берлянда. • Учитывает топографические факторы рассеивания вредных веществ (коэффициент рельефа местности). • Возможность проведение расчета при неблагоприятных метеорологических условиях. • Учитывает, как параметры источника загрязнения, так и параметры выброса. Недостатки: • Не учитывает влажность воздуха. • Не учитывает влияние жилой застройки и озеленение территории. • Не найдено влияние давления атмосферного воздуха в сочетании оказываемого воздействия на человека.

Обсуждение

Несмотря на все достоинства и недостатки представленных расчетных моделей, к настоящему времени общепринятой модели не существует. Это объясняется сложностью и разнообразием процессов, происходящих в атмосфере, потому что выбрасываемые вещества могут быть активны и взаимодействовать между собой. Также постоянно меняющееся погодные условия и многие другие факторы ограничивают в выборе постоянной модели.

Если посмотреть на выше проведенный сравнительный анализ, то каждая из моделей учитывает, как местоположение, так и характеристики источника выброса, однако при анализе других механизмов, таких как метеорологические и топографические факторы рассеивания вредных веществ, в некоторых моделей об этом сказано лишь посредственно либо не учитывается вообще.

Выбор расчетной модели определяется поставленными задачами экологических организаций перед охраной воздуха и от точности моделирования. Все зависит от того, на что направлена экологическая политика той или иной организации.

Также следует отметить следующее преимущество, благодаря которому необходимо обязательно проводить такую аналитическую работу — это предпосылки для создания новых, более качественных и имеющих мощные инструменты для прогнозирования и проведения автоматизированных расчетов модели рассеивания вредных веществ. К тому же если посмотреть на сравнительный анализ существующих методик, моделей и методов расчета еще раз, то можно заметить, что ни в одной из них не уделено изучению влияния озеленение территории, влажности и давления на изменение динамики концентрации вредных веществ в приземном слое атмосферы.

В изучении вопросов инженерной экологии есть два очень важных и незаменимых критерия — прозрачность и качество предоставляемых данных. И здесь отличным способом станет применение и создание модели машинного обучения — эффективного метода, с помощью которого можно находить новые взаимосвязи в виде математических формул.

Методы машинного обучения позволяют не только заниматься прогнозированием в режиме реального времени, но и с помощью них можно обрабатывать большие массивы данных, собранные по данным метеорологических и экологических станциях мониторинга [10, с. 110].

Заключение

Проведен сравнительный анализ наиболее популярных существующих методик, моделей и методов расчета концентраций вредных веществ в приземном слое атмосферы с учетом влияния механизмов рассеивания вредных веществ, были определены области применения существующих методик расчета и выявлены достоинства и недостатки.

После проведения сравнительного анализа следует, что для решения природоохранных задач имеет место быть разработке новой методики или модели расчета загрязняющих веществ, учитывая влияние влажности и давление воздуха, а также озеленение территории.

В ходе работы было предложено использование и создание модели машинного обучения, как эффективного метода для нахождения новых зависимостей между переменными и прогнозирования содержание вредных веществ в атмосфере с учетом механизмов рассеивания веществ в режиме реального времени.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кесарецких К.С., Горлов П.В. Состав выбросов теплоэнергетики и их влияние на здоровье население // Актуальные проблемы авиации и космонавтики. Секция «Техносферная безопасность». — 2021. Том 2. С. 733–735.
2. Дрыгваль А.В., Дрыгваль П.В., Табунщик В.А. Оценка содержания диоксида азота (NO_2) в атмосфере над крымским полуостровом в период 2019–2023 гг. // Учёные записки Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского. География. Геология. Том 10 (76). № 4. 2024 г. С. 53–67.
3. Madiyarov M.; Temirbekov N.; Alimbekova N.; Malgazhdarov Y.; Yergaliyev Y.A. Combined Approach for Predicting the Distribution of Harmful Substances in the Atmosphere Based on Parameter Estimation and Machine Learning Algorithms. Computation 2023, 11, 249. p. 1–25.
4. Акимов Л.М., Акимов Е.Л. Пространственно-временные закономерности формирования аэротехногенного загрязнения атмосферы в условиях вертикальной «неустойчивости» в Центральном Черноземье // Известия Дагестанского государственного педагогического университета. Естественные и точные науки. 2023. Т. 17. № 2. С. 11–22.
5. Семакина А.В. Основные математические подходы для оценки процессов рассеяния примеси в атмосферном воздухе // Антропогенная трансформация природной среды. 2024. Т. 10. № 2. С. 42–64.
6. Aydosov A.; Urmashev B.; Zaurbekova G. Modeling the spread of harmful substances in the atmosphere at a variable velocity profile. Open Eng. 2016, 6, p. 264–269.
7. Zhou H., Song W., Xiao K. Simulating flow and hazardous gas dispersion by using WRF–CFD coupled model under different atmospheric stability conditions. Atmosphere 2022, 13, 1072.
8. Сысоева Е.В., Гельманова М.О. Методы расчета рассеивания загрязняющих веществ в городской атмосфере // Вестник МГСУ. 2022. Т. 17. Вып. 8. С. 1027–1045.
9. Ветрова Ю.В., Радоуцкий В.Ю. Модели распространения вредных веществ в окружающей среде // Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова. 2012, №4. С. 159–162.
10. Федутинов К.А. Машинное обучение в задачах поддержки принятия решений при управлении охраной природы / К.А. Федутинов // Инженерный вестник Дона. — 2021. — № 9(81). — С. 100–113.

© Завитаев Кирилл Витальевич (k.zavitaev@stankin.ru); Ягольницер Ольга Владимировна (o.yagolnicer@stankin.ru)
Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»