

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ИСТОЧНИКОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ: ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

М.Ф. Кожевникова, В.В. Левенец, И.Л. Ролик

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина*

E-mail: levenets@kipt.kharkov.ua; тел. +38(057)335-68-29

Представлен обзор вычислительных методов, которые применяются для идентификации источников загрязнения. Показана необходимость их использования для изучения влияния атомной энергетики на экологическую ситуацию в Украине.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема охраны окружающей среды является крайне наукоемкой и находится на стыке целого ряда областей физики, химии и математики. Она требует большого объема экспериментальных исследований, направленных на мониторинг состояния окружающей среды, а также сложных теоретических исследований, целью которых является разработка адекватных моделей, включающих идентификацию источников загрязнений, количественную оценку скорости выделения загрязнителей, понимание транспортировки выбросов от источника к месту выпадения и знание физических и химических процессов преобразования выделенных веществ, которые могут произойти в течение этой транспортировки.

Задачи мониторинга окружающей среды требуют привлечения современных вычислительных средств, что обусловлено необходимостью обработки больших объемов информации, в частности, ее сортировки, предварительной обработки для дальнейшего использования в сложных вычислительных алгоритмах исследований процессов, связанных с переносом веществ, загрязняющих окружающую среду.

Создание моделей оценивания полей концентраций и параметров источников с использованием данных наблюдений и модельных представлений о процессах распространения примесей позволяет более надежно контролировать основные параметры техногенного загрязнения местности. Этот подход дает возможность определять информативность систем наблюдений и оптимизировать положение и количество точек отбора проб.

Задача идентификации источников загрязнения актуальна, так как ее решение позволяет установить вклад отдельных источников (предприятия, города, страны) в загрязнение воздуха или почвы в данной точке. Это необходимо учитывать при создании новых источников загрязнений – ввода новых промышленных предприятий и управлении выбросами существующих, чтобы суммарное их количество не превышало установленных норм.

Для определения возможных источников загрязнения используются методы, в основе которых лежит решение обратных задач переноса примеси, которые позволяют по ограниченному числу точек

наблюдений восстановить параметры источников и поля аэрозольного загрязнения местности.

В этих методах часто используются уравнения гидродинамики, которые являются нелинейными уравнениями в частных производных. Хорошо известно, что они требуют значительных усилий как для аналитического исследования, так и для численного решения. Математическим методам исследования уравнений гидродинамики посвящено большое число работ таких математиков, как А.А. Самарский, Г.И. Марчук, О.М. Белоцерковский. В частности, математическим методам исследования проблем окружающей среды посвящена монография Г.И. Марчука [1].

Наиболее значительный объем фундаментальных исследований в области окружающей среды проводится в США, странах Европы и России. В США они сосредоточены в US Environmental Protection Agency. Один из развиваемых подходов является Receptor Modeling, который широко используется в мировой практике для определения характеристик источников загрязнения окружающей среды; детально этот метод изложен в работах [2-4]. В России также ведутся обширные научные исследования в области применения вычислительных методов в экологических исследованиях. Однако эти подходы чаще не используют те вычислительные методы исследования, которые получили распространение в мировой практике.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ОПИСЫВАЮЩИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ПРИМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ

Теоретические и экспериментальные исследования процессов распространения примесей и особенностей их пространственно-временного распределения являются основой для объективной оценки состояния и тенденций изменения загрязнения воздушного бассейна и водных объектов, а также разработки мероприятий по оптимальному снижению негативного воздействия загрязнений на окружающую среду. Без этих исследований достаточно проблематично определение репрезентативных мест и времени наблюдения в целях создания эффективной системы контроля состояния атмосферного воздуха, почвы, растительности, водных объектов. Процесс распространения промышленных выбросов происходит в результате их переноса воз-

душными массами и диффузии. При решении задач реконструкции загрязнения местности возникают существенные трудности, связанные с недостаточностью данных измерений состояния загрязнения и метеонаблюдений, неопределённостью задания положения источника и его характеристик. Реализация компромисса между модельными представлениями о протекающих процессах загрязнения, данными измерений и дополнительной априорной информации может быть получена в рамках постановок оптимизационных задач, которые находят всё более широкое применение в задачах динамики атмосферы, океана и охраны окружающей среды. Соответствующие математические модели содержат ряд параметров, значения которых либо не известны, либо заданы приближённо и требуют дальнейшего уточнения на основе постановок обратных задач. В частности, к задачам такого типа относятся оценивание положения и мощности источников тепла и примесей по результатам косвенных наблюдений, определение физико-химических характеристик выбрасываемых веществ и их последующей трансформации в атмосфере и водной среде, восстановления полей концентраций газовых и аэрозольных примесей.

Одним из методов исследования атмосферных процессов, описывающих перенос и диффузию примесей в атмосфере, является численное моделирование. В этом случае возможно два подхода. Первый – это решение «прямых» задач, когда по известным характеристикам источников примеси требуется найти поле её концентрации. Второй – решение «обратных» задач, когда по информации о концентрации примеси, измеренной в ряде контрольных точек, требуется найти тип, координаты и мощность её источников. Наиболее универсальными моделями для получения количественных и качественных картин распространения загрязнений в атмосфере являются полуэмпирические модели.

Различные модели переноса и диффузии, используемые в экологии, представлены, в частности, в [1]. Для описания процессов распространения примеси в атмосфере может быть использовано двумерное уравнение турбулентной диффузии [5–6], которое имеет вид:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(v_x q) + \frac{\partial}{\partial y}(v_y q) = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial q}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial q}{\partial y} \right) + f(x, y) \cdot g(t), \quad (1)$$

где $q = q(x, y, t)$ – интегральная по высоте концентрация примеси; (v_x, v_y) – векторы скорости ветра; (K_x, K_y) – векторы коэффициентов турбулентной диффузии; $f(x, y)$ – функция, характеризующая пространственное расположение источника загрязнения; $g(t)$ – интенсивность действия источника.

Значительная роль в создании и развитии методов численного анализа и математического моделирования подобных уравнений принадлежит академику Г.И. Марчуку. Методы расщепления и сопряженных уравнений широко используются в настоящее время для решения многомерных нестационарных задач для уравнений с частными производными. Кроме метода расщепления интерес представ-

ляет также метод независимых потоков, предназначенный для численного решения многомерного уравнения теплопроводности (массопереноса).

Для исследования процессов переноса и выпадения аэрозольных примесей в статьях [7–8] предлагается уравнение другого типа – полуэмпирическое уравнение турбулентной диффузии, которое имеет вид:

$$u \frac{\partial q}{\partial x} - w \frac{\partial q}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} k \frac{\partial q}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial q}{\partial y} - \pi q, \quad (2)$$

где ось x ориентирована по направлению ветра, y расположена в поперечном направлении, z направлена вертикально вверх; $q(x, y, z)$ – концентрация примеси; $u(z)$ – скорость ветра; w – скорость оседания аэрозольных частиц; $k(z), \mu(z)$ – коэффициенты вертикального и горизонтального турбулентного обмена; π описывает трансформацию примеси. Граничные условия для этого уравнения содержат также мощность и эффективную высоту источника.

В работе [9] используются другие формы уравнений переноса, при применении которых степень достоверности полученных решений определяется двумя факторами:

- наличием подробной и достоверной информации о поле ветра, температурной стратификации, поглощающих свойствах подстилающей поверхности и интенсивности осадков;
- качеством аппроксимаций, описывающих влияние рельефа.

Из уравнений типа (1)–(2) и им подобных могут быть получены частные решения для точечных или площадных источников, содержащие неизвестные параметры этих источников [8,9]. Эти параметры могут быть определены по результатам измерения концентраций в некотором количестве точек, которое должно быть не меньше числа параметров, подлежащих определению.

Отсутствие исходных данных о мощностях источников выбросов, искажение граничных и начальных условий, неадекватный учет метеорологических характеристик атмосферы приводят к существенным расхождениям между расчетными и экспериментальными данными. В этой связи представляется целесообразным совместное решение прямых и обратных задач распространения примесей в атмосфере на основе данных о замерах концентрации примеси в стационарных мобильных пунктах контроля. Такой подход позволяет рассчитывать на существенное повышение точности модельных расчетов на математических моделях приемлемой сложности.

В работе [10] подобный подход был использован для оценки радиационных доз и мощностей доз в различные моменты времени и на разных удалениях от источника (рис. 1).

Примером использования выражения для распределения пылеаэрозольного вещества от точечного источника по минимальному количеству точек для исследования геоэкологического состояния г. Новосибирска может быть работа [11].

Подобный подход описан в [12] при экспериментальных и теоретических исследованиях загрязнений снежного покрова вблизи одного из нефтегазовых факелов на севере Тюменской области. Интерпретация полученных данных измерений ионного состава снега проводилась с помощью регрессионной зависимости, полученной на основе решений полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии и переноса примеси в приземном слое атмосферы.

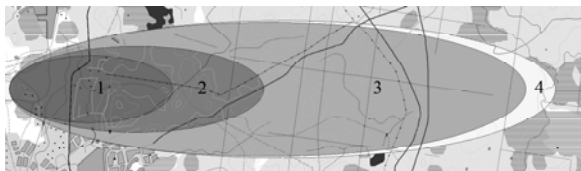


Рис. 1. Факел радиационного выброса:
1 – эвакуация; 2 – йодная профилактика; 3 – йодная профилактика только детей; 4 – укрытие

Следует отметить некоторые особенности экологических задач для городов, имеющих сложный рельеф местности и сложную систему циркуляции [13]. В этом случае достоверную картину распространения загрязняющих веществ можно получить только путем создания оригинальной трехмерной модели циркуляции для каждого города или поселка. При этом дополнительные осложнения вносит отсутствие градиентных наблюдений на большинстве гидрометеорологических станций и достоверной информации о степени устойчивости атмосферы и интенсивности турбулентного обмена.

Обратные задачи в различной постановке нашли широкое применение при исследовании экологических проблем. В частности, примером такой задачи является определение функции $f(x, y)g(t)$ в правой части уравнения (1), когда известна зависимость распределения концентрации примеси $q = q(x, y, t)$. В общем случае исследование взаимосвязей между выбросами и выпадениями подразумевает поиск функциональных зависимостей вида [9]:

$$wQ = M, \quad (3)$$

где Q – матрица выбросов для заданного набора загрязнителей от известного числа инвентаризованных источников выбросов; M – матрица выпадений заданного набора загрязнителей (и их производных) в произвольном числе точек на земной поверхности (рецептов); w – оператор рассеивания и трансформации выбросов. По виду оператора w и способу его задания классифицируют модели рассеивания. В зависимости от состава и достоверности известных и искомых параметров уравнения (3) возможны такие постановки задачи:

– уточнение данных инвентаризации локальных источников (Q) или идентификация источников выбросов;

– изучение закономерностей распространения загрязняющих веществ (w), в том числе построение

детерминированных и статистических моделей рассеивания;

– определение антропогенной нагрузки на заданной территории (M), в частности, реконструкции полей загрязнения, задача оценки воздействия на окружающую среду (ОВОС) и др.

Обратная задача в постановке, представленной уравнением (3), подобна подходу Receptor Modeling, изложенному в [2-4], который получил широкое распространение в зарубежной (за пределами СНГ) мировой практике. Идеология Receptor Modeling будет изложена ниже. Проблеме рецепторного моделирования также посвящена работа [13]. Остановимся несколько подробнее на методике, изложенной в этой работе, и сравним с подходом, представленным в [2-4]. Постановка задачи в этих работах сводится к уравнению

$$x_{ij} = \sum_p g_{ip} f_{pj} + e_{ij}, \quad (4)$$

где x_{ij} – измеренная концентрация j -го соединения в i -м образце; f_{pj} – концентрация j -го соединения в материале, испускаемом p -м источником – профиль источника (source profile); g_{ip} – вклад p -го источника в i -й образец; e_{ij} – доля измерений, которая не может быть подогнана моделью. Постановка задачи в соответствии с [13] имеет вид:

$$M_i(X_k, Y_k) = \sum_j Q_{ij} x_{jk} + G_{ik} - \sum_j Q_{ij} P_{jk}, \quad (5)$$

где $M_i(X_k, Y_k)$ – масса i -го вещества в k -й точке; Q_{ij} – выброс i -го вещества j -м источником; x_{jk} – вклад j -го источника в k -й точке; G_{ik} – вклад фонового загрязнения; P_{jk} – доля выброса j -го источника, уходящего в дальний перенос за пределы территории наблюдения. В [13] вклады от источников аппроксимируются некоторыми функциями, зависящими от координат точки наблюдения неизвестных координат источника, а также от других его параметров. По идеологии работ [2-4] вклады от источников подлежат определению из уравнения (4). В работе [13] параметры источников определяются путем минимизации функционала, порождаемого системой уравнений (5), относительно этих параметров. Функционал схематически может быть представлен следующим образом:

$$\Phi = \sum_{i,k} (M_i(X_k, Y_k) - F(\bar{a}))^2, \quad (6)$$

где $F(\bar{a})$ – правая часть уравнения (5), \bar{a} – совокупность всех параметров, характеризующих источники выбросов. Такая задача позволяет восстановить не только параметры источников, но и распределение загрязнений во всей исследуемой области. Однако задача (6) так же, как и задача (4), может иметь несколько минимумов и соответственно несколько решений. При решении таких задач необходимы дополнительные исследования на единственность решения [14].

В работе [15] анализируется возможность применения методов рецепторного моделирования, в

частности, рассматривается подход, основанный на изучении химических «отпечатков пальцев». Приводятся результаты определения вкладов крупного теплоисточника в загрязнение окружающей среды на примере промышленной зоны г. Шелехова (рис. 2).

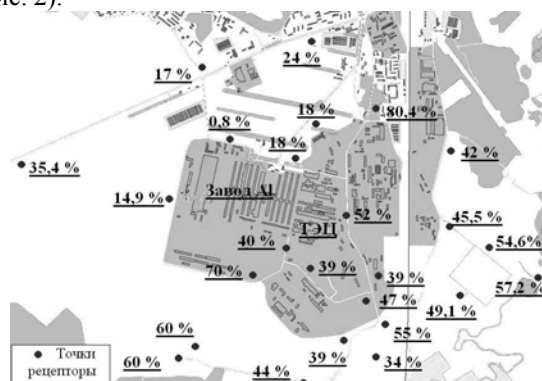


Рис. 2. Идентификация вклада ТЭЦ в загрязнение территории г. Шелехова

Использование методик, базирующихся на принципах химических «отпечатков пальцев» (fingerprints), позволяет установить реальный вклад отдельных источников (предприятия, города, страны) в загрязнение среды в данной точке–рецепторе. Этот метод основан на анализе химического состава загрязнения в точке–рецепторе, при котором вклады отдельных источников выявляются по соотношению заданного набора соединений. Для этого требуется располагать детальными сведениями о химическом составе выбросов всех потенциально влияющих источников. Идентификация выбросов путем снятия химических «отпечатков пальцев» (chemical fingerprinting) рассматривается как новое направление при разработке методического обеспечения охраны воздушного бассейна.

Рассмотрим еще некоторые варианты постановки обратных задач. В частности, в [5,6] детально рассмотрена задача определения функции $g(t)$ для уравнения (1), когда функция $q=q(x,y,t)$ известна. Обратная задача для источника характеризуется неустойчивостью решения к погрешностям замеров концентрации и требует специальных методов решения. Для этого используется метод последовательной функциональной аппроксимации. Для значений функции $g(t)$ в фиксированные моменты времени получена система алгебраических уравнений, решение которой отыскивается путем минимизации функционала, учитывающего погрешность определения исходных данных.

Следует отметить работы [16-18], в которых рассматривается одна из обратных задач по идентификации мгновенного источника или источника загрязнений с постоянной мощностью. Для этого используется трехмерное нестационарное уравнение адвекции–диффузии, подобное уравнению (1). Источниковое слагаемое имеет вид:

$$S = Q_0 \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \delta(t - t_0),$$

что соответствует выбросу вредной примеси в точке с координатами (x_0, y_0, z_0) в момент времени t_0 . Для решения исходной задачи выводится вспомога-

тельное сопряженное уравнение, которое в общем случае позволяет определить координаты и другие параметры источника. Методика решения обратных задач для дифференциальных уравнений в частных производных с помощью метода «сопряженных задач» детально изложена в [1]. Для решения задач, изложенных в [16-18], используются алгоритмы параллельных вычислений.

ОБЗОР МЕТОДОВ RECEPTOR MODELING

В обзоре [2] изложены основные идеи рецепторного моделирования, а также кратко изложены такие методы, как CMB, UNMIX и PMF. Методу PMF (Positive Matrix Factorization) уделено наибольшее внимание.

Первоначально основные принципы рецепторного моделирования были изложены в [3,4]. Его фундаментальными принципами являются сохранение массы и массовый баланс. Исходными данными являются составляющие химические компоненты, содержащиеся как элементарные концентрации в большом числе образцов. Основное уравнение массового баланса для m химических компонент в n образцах от вклада p независимых источников может быть представлено следующим образом:

$$x_{ij} = \sum_p g_{ip} f_{pj} + e_{ij}, \quad (7)$$

где x_{ij} – измеренная концентрация j -го соединения в i -м образце; f_{pj} – концентрация j -го соединения в материале, испускаемом p -м источником – профиль источника (source profile); g_{ip} – вклад p -го источника в i -й образец; e_{ij} – доля измерений, которая не может быть подогнана моделью. Существует ряд естественных физических ограничений, которые должны выполняться:

- исходные данные необходимо воспроизводить моделью, которая объясняет наблюдения;
- предсказанные составы источников должны быть неотрицательными, источник не может иметь отрицательную элементную концентрацию;
- все предсказанные вклады источников в аэрозоль должны быть неотрицательными; источник не может испускать отрицательную массу;
- сумма предсказанных вкладов элементарных масс для каждого источника должна быть меньше или равна полной измеренной массе для каждого элемента.

Декомпозиция матрицы x_{ij} в виде (7) выражает ее представление по главным компонентам – метод PCA (Principal Component Analysis) [19], g_{ip} представляет в этом случае матрицу счетов, f_{pj} – матрицу нагрузок, e_{ij} – матрицу остатков. В общем случае задача состоит в определении числа главных компонент, которое равно рангу матрицы x_{ij} . Задача разделения матрицы x_{ij} на составляющие называется разделением кривых. Когда метод главных компонент применяют для разделения данных на осмысленные компоненты, его часто называют фак-

торным анализом. Метод главных компонент можно трактовать как проецирование данных на подпространство меньшей размерности. Возникающие при этом остатки e_{ij} рассматриваются как шум, не содержащий значимой информации.

Соотношение (7) представляет собой разложение по главным компонентам двумерной матрицы, по хемометрической терминологии – двухмодальной (two-way data array). Аналогично можно рассмотреть трехмерную матрицу, соответственно используются термины: трехмодальная матрица (three way data array). В последнем случае для декомпозиции матрицы, в частности, может быть использован метод PARAFAC [19, 20]. В этом случае декомпозиция представляется следующим образом:

$$x_{ijk} = \sum_{r=1}^R a_{ir} b_{jr} c_{kr} + e_{ijk} \quad (8)$$

Разложение строится так, чтобы минимизировать сумму квадратов остатков. Достоинством этого метода является единственность разложения. В моделях рецепторного моделирования могут использоваться оба варианта.

В рецепторных моделях при решении уравнения (7) можно выделить два подхода, в зависимости от того, какая информация доступна. Если количество и состав источников в регионе известны (т.е. p и f_{pj}), то неизвестным является только массовый вклад каждого источника в каждый образец. Такой подход был предложен в [21,22]. Проблема решается с помощью эффективного варианта метода наименьших квадратов, который может быть отнесен к ранее упомянутому методу СМВ. Программное обеспечение представлено на сайте US Environmental Protection Agency <http://www.epa.gov/ttn/SCRAM>. Были предложены также методы решения, использующие многомерные калибровочные методы, предложенные в [23]. Библиотека US Environmental Protection содержится в SPECLATE на сайте <http://www.epa.gov/ttn/CHIEF>.

Значительно большее внимание в обзоре [2] и в других источниках уделяется случаю, когда источники загрязнения не известны. Это является формой факторного анализа (factor analysis), но полностью отличается от традиционного метода PCA. Здесь можно отметить два ранее упомянутых подхода: UNMIX [24-26] и PMF [27-29].

Модель UNMIX основывается на анализе собственных чисел. Она представляет собой новый тип многовариантной рецепторной модели, основанной на методе PCA. Модель использует новый трансформационный метод автомоделного разрешения кривых (self-modeling curve resolution SMCR) [19]. Поскольку уникальное решение невозможно, SMCR-техника ограничивает правдоподобную область реального решения в небольшой области с явными физическими ограничениями: состав источников должен быть большим или равным нулю. Явные физические ограничения образуют ограничения типа неравенств в пространстве, натянутом на собственные векторы, и эти ограничения образуют допустимую область в пространстве собственных век-

торов. Модель UNMIX разрабатывается для того, чтобы определить наиболее важные источники, дающие вклад в измеренные массовые концентрации. В [2] приведены примеры практического использования UNMIX. Предполагается, что UNMIX в виде программы будет размещена на сайте <http://www.epa.gov/ttn/SCRAM>.

Модели PMF в обзоре [2] уделено более существенное внимание. Ее реализация в конкретных случаях изложена, например в [20,30]. PMF значительно отличается от других методов факторного анализа. Все другие методы используют сингулярное разложение матрицы. PMF использует метод наименьших квадратов для минимизации объектной функции, которая имеет вид:

$$Q = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m \left[\frac{x_{ij} - \sum_{p=1}^p g_{ip} f_{pj}}{s_{ij}} \right]^2, \quad (9)$$

где s_{ij} – оценка ошибки j -й химической компоненты измеренной 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, т.е. профили источников и их вклады в образцы выбираются так, чтобы минимизировать сумму всех остатков e_{ij} . Для решения проблемы PMF разработано несколько подходов. Первоначально была разработана программа PMF2, использующая уникальный алгоритм [27] для решения задачи факторного анализа. Позднее разработан альтернативный гибкий подход для решения различных задач факторного анализа методом наименьших квадратов [28]. В [2] приводятся многочисленные примеры использования PMF.

В работах [20,30,31] рассматривается случай данных, которые названы «недостающими» (missing). Можно выделить три вида данных. Для большинства данных величины концентраций могут быть определены, т.е. известны x_{ij} , а также их ошибки s_{ij} . Существуют образцы, в которых концентрации некоторых химических соединений ниже предела детектирования. Кроме того, в некоторых случаях величины не могут быть определены. В [20,31] предлагаются алгоритмы определения самих недостающих данных и их ошибок. PMF использует алгоритм, в котором на каждом шаге варьируются обе матрицы: g_{ip} и f_{pj} . Особенностью PMF является то, что использование естественных физических ограничений (неотрицательность g_{ip} и f_{pj}) в общем случае не является достаточным, чтобы гарантировать уникальное физически действительное решение. В PCA алгоритм формируется иерархически, т.е. решение большей размерности содержат все факторы меньшей размерности. В PMF факторы не являются ортогональными, и иерархичность отсутствует. В PMF моделирование выполняется первоначально с различным числом факторов. Для оп-

ределения числа факторов необходимо проверить подгонку модели и интерпретируемость результатов факторов.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕСТА ЛОКАЛИЗАЦИИ ИСТОЧНИКОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ

Изложенные в предыдущем разделе методы Resceptor Modeling позволяют в принципе определить как характеристики источников загрязнения, так и вклад отдельных источников в конкретные образцы. Однако остается открытым вопрос о месте расположения самих источников загрязнений. Некоторые из методов, которые предназначены для решения этой задачи, упомянуты в [32]. Они основаны на анализе траекторий воздушных масс, переносящих загрязнения. В работах [2, 32-35] уделено внимание методу PSCF (функция вклада потенциальных источников – potential source contribution function). На рис. 3 показано применение метода PSCF для идентификации количества выпадений загрязнений в г. Сеуле (Корея).

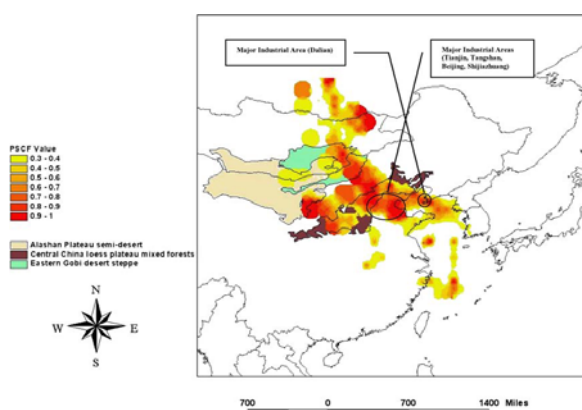


Рис. 3. Вероятные области воздействия г. Сеул (Корея)

В работе [32] кроме упомянутого PSCF кратко описано еще несколько методов, которые предназначены для определения локализации источников загрязнений. К ним относятся CVT – Concentration Weighted Trajectory; RTWC – Residence-Time Weighted Concentrations; QTBA – Quantitative Transport Bias Analysis; SQTBA – Simplified QTBA. В [32,33] приводится сравнение результатов использования методов RTWC и PSCF применительно к обработке конкретных данных. В дальнейшем подробнее остановимся на PSCF, суть которого кратко изложена в [2,34,35].

Географическая область, в которой производится поиск источников загрязнения, покрывается сеткой, положение каждой из ячеек которой характеризуется парой чисел. В PSCF вычисляют траектории, по которым переносятся воздушные потоки, проходящие через конкретную ячейку. Эти траектории проходят через области, в которых производится регистрация загрязнений при сборе образцов, используемых в Resceptor Modeling. Если источники загрязнений располагаются на этих траекториях, то эти загрязнения воздушными потоками переносятся в те места, где производится сбор образцов. PSCF

определяется как математическая величина следующим образом:

$$PSCF_{ij} = \frac{m_{ij}}{n_{ij}}, \quad (10)$$

где n_{ij} – полное число траекторий, проходящих через ячейку; m_{ij} – число траекторий, соответствующих высокой концентрации загрязнителя. Ячейки, для которых PSCF близка к единице, рассматриваются как потенциальные источники загрязнений.

Для расчета траекторий, по которым перемещаются воздушные массы, используется программа HYSPLIT модель – The Hybrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model. Более подробная информация о программе HYSPLIT4 может быть получена на сайтах <https://www.ready.noaa.gov/ready/open/hysplit4.html> и <http://www.arl.noaa.gov/HYSPLIT.php>.

ВЫВОДЫ

По мнению авторов, наиболее практичным математическим аппаратом для определения характеристик и места локализации источников загрязнения в настоящее время представляет методика Resceptor Modeling, изложенная в [2-4]. Она включает два типа программных продуктов. Первый – программа PMF предназначена для определения параметров источников, второй – программа HYSPLIT, которая позволяет по метеорологическим данным восстановить обратные траектории распространения вредных примесей в атмосфере и определить местоположение источников.

Алгоритм PMF имеет следующие основные характеристики:

- 1) позволяет определить число источников загрязнения, их характеристики и вклад каждого источника в образец, в котором зарегистрировано загрязнение;
- 2) требует определенной подготовительной работы; необходимо определить погрешности измерений, недостающие данные;
- 3) не гарантирует однозначного решения. Сложной проблемой является решение вопроса о числе источников загрязнения. Полученное решение требует дополнительной математической диагностики;
- 4) результаты PMF-анализа, в принципе, позволяют определить локализацию источников загрязнения (при дальнейшем использовании розы ветров и метода HYSPLIT).

Вышеупомянутые алгоритмы не решают вопроса о месте локализации источников загрязнения окружающей среды. Для этого может быть использована методика PSCF, хотя кроме нее используются и другие методы, о которых упомянуто выше. Составной частью этого подхода является алгоритм HYSPLIT, который используется для расчета траекторий распространения воздушных масс, переносящих загрязнения окружающей среды.

Следует заметить, что в странах СНГ не удалось найти примеров использования метода Resceptor Modeling, но используется метод HYSPLIT.

В России проводится широкий круг теоретических исследований по идентификации источников вредных выбросов в атмосферу, основанных непосредственно на решении дифференциальных уравнений. Такие задачи требуют большого объема исходных данных и сложных математических методов решения. По всей вероятности, готовые для использования программы, реализующие эти методы, отсутствуют. Кроме того, в найденных периодических изданиях, посвященных данным проблемам, математическая постановка недостаточно универсальна.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г.И. Марчук. *Математическое моделирование в проблеме окружающей среды*. М.: «Наука», 1982, с.320.
2. P.K. Hopke. Recent developments in receptor modeling // *Journal of Chemometrics*. 2003, v.17, p.255-265.
3. P.K. Hopke. *Receptor Modeling in Environmental Chemistry*. Wiley: New York, 1985.
4. P.K. Hopke. *Receptor Modeling for Air Quality Management*. Elsevier: Amsterdam, 1991.
5. А.А. Чубатов, В.Н. Кармазин. Экспресс-контроль за источником загрязнения атмосферы на основе метода последовательной функциональной аппроксимации // *Вестник Саратовского государственного технического университета. Сер. Физ.-мат. науки*. 2008, №2(17), с.210-214.
6. А.А. Чубатов, В.Н. Кармазин. Устойчивая оценка интенсивности источника загрязнения атмосферы на основе метода последовательной функциональной аппроксимации // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2009, т. 1, №4, с. 391-403.
7. Т.В. Ярославцева. Численное моделирование процессов распространения сульфатного аэрозоля вблизи селитерного озера // *Информационные системы: Труды Постоянно действующей научно-технической школы-семинара*. 2004, с. 22.
8. Т.В. Ярославцева. *Методы восстановления полей выпадений аэрозольных примесей от площадных источников*: Автореф. ... канд. техн. наук. Новосибирск, 2007, с.121.
9. Е.В. Кучменко, М.С. Зароднюк, О.А. Балышев, Е.В. Моложникова. Идентификация вклада теплоисточников в загрязнение снежного покрова городов // *Известия Российской академии наук. Энергетика*. 2006, №3, с.162-171.
10. С.А. Колчев, В.В. Ткаченко. Методика консервативного прогноза распространения радиоактивной примеси в атмосфере // *Материалы 49 Научной конференции МФТИ*. М., 2008, с.112-116.
11. А.Ю. Девятова. *Тяжелые металлы в депонирующих средах и прогнозная модель переноса примесей от стационарных техногенных источников*: Автореф. ... кандидат. геолого-минерал. наук. Новосибирск, 2006, с.14.
12. В.Ф. Рапута, Б.С. Смоляков, К.П. Куценогий. Оценка содержания нитратов сульфатов в снегу окрестностей нефтегазового факела // *Сибирский экологический журнал*. 2000, №1, с.103-107.
13. М.С. Зароднюк, Е.В. Кучменко, Е.В. Моложникова, И.И. Маринайте, О.Г. Нецветаева. Восстановление полей загрязнения методами рецепторного моделирования на примере пос. Хомутово // *Оптика атмосферы и океана*. 2006, т. 19, № 6, с. 557-561.
14. О.В. Васильев. *Лекции по методам оптимизации*. Иркутск: Изд-во Иркутского университета, 1994, с. 344.
15. Е.В. Кучменко, М.С. Зароднюк, О.А. Балышев, Е.В. Чипанина, И.В. Томберг, Л.М. Сорокикова, Н.А. Онищук. Оценка вклада промышленной зоны города Шелехова в загрязнение геосистемы долины реки Олхи // *Известия Самарского научного центра Российской академии наук*. 2009, т. 11, №1(3), с. 301-306.
16. Е.А. Панасенко, А.В. Старченко. Численное решение некоторых обратных задач с различными типами источников атмосферного загрязнения // *Вестник Томского государственного университета. Серия «Математика и механика»*. 2008, №2(3), с. 47-55.
17. Е.А. Панасенко. *Численное решение обратных задач переноса примеси на многопроцессорных вычислительных системах*: Автореф. ... канд. физ.-мат. наук. Томск, 2010, с. 14.
18. А.В. Старченко, Е.А. Панасенко. Параллельная реализация численного метода решения обратных задач переноса примеси // *Вестник УГАТУ*. 2010, т. 14, №5(40), с. 133-139.
19. О.Е. Родионова, А.Л. Померанцев. Хемометрика: достижения и перспективы // *Успехи химии*. 2006, т.75, №4, с.302-321.
20. Yu-Long Xie, P.K. Hopke, P. Paatero, L.A. Barrie, Shao Meng Li. Identification Of Source Nature and Seasonal Variations of Arctic Aerosol by Positive Matrix Factorization // *Journal of the Atmospheric Sciences*. 1999, v. 56, p. 249-260.
21. J.W. Winchester, G.D. Nifong. Water pollution in Lake Michigan by trace elements from pollution aerosol fallout // *Water, Air and Soil Pollution*. 1971, v. 1, p. 50-64.
22. M.S. Miller, S.K. Friedlander, G.M. Hidy. A chemical element mass balance for pasdena aerosol // *J. Colloid Interface Sci*. 1972, v. 39, p. 65-176.
23. C. Seigneur, P. Pai, J.F. Louis, P.K. Hopke, D. Grosjean. *Review of Air Quality Models for Particulate Matter*: Report 4669. American Petroleum Institute: Washington, DC, 1997, p. 311.
24. R.C. Henry. Multivariate receptor models // *Receptor Modeling for Air Quality management* / P.K. Hopke (ed). Elsevier. Amsterdam, 1991, p. 117-147.
25. R.C. Henry, B.M. Kim. Extension of self-modeling curve resolution to mixtures of more than three components. Part 1. Finding the basic feasible region // *Chemom Intell. Lab. Syst.* 1989, v. 8, p. 205-216.
26. B.M Kim, R.C. Henry. Extension of self-modeling curve resolution to mixtures of more than three components. Part 2. Finding the complete solution // *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 1999, v. 49, p. 67-77.

27. P. Paatero. Least squares formulation of robust, nonnegative factor analysis // *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 1997, v. 37, p. 23-35.
28. P. Paatero. The multilinear engine – a table-driven least squares program for solving multilinear problems, including the n-way parallel factor analysis model // *J. Comput. Graph. Stat.* 1999, v. 8, p. 854-888.
29. P. Paatero, P.K. Hopke, X.H. Song, Z. Ramadan. Understanding and controlling rotations in factor analytic model // *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 2002, v. 60, p. 253-264.
30. V.A. Lanz, C. Hueglin, B. Buchmann, M. Hill, J. Staehelin, S. Reimann. Receptor Modeling of C₂–C₇ hydrocarbon sources at an urban background site in Zurich, Switzerland: changes between 1993–1994 and 2005–2006 // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2008, v. 8, p.2313-2332.
31. P.K. Hopke. A Guide to Positive Matrix factorization // <http://people.clarkson.edu/~hopkep/ MF-Guidance.htm>.
32. L. Zhou, P.K. Hopke, W. Liu. Comparison of two trajectory based models for locating particle sources for two rural New York sites // *Atmospheric Environment*. 2004, v. 38, p. 1955-1963.
33. Y. Han, T.M. Holsen, P.K. Hopke, J. Cheong, H. Kim, S.Yi. Identification of source location for atmospheric dry deposition of heavy metals during yellow-sand events in Seoul, Korea in 1998 using hybrid receptor models // *Atmospheric Environment*. 2004, v. 38, p. 5353-5361.
34. N.J. Pekney, C.I. Davidson, L. Zhou, P.K. Hopke. Application of PSCF and CPF to PMF-Modeled Sources of PM_{2.5} in Pittsburgh // *Aerosol Science and Technology*. 2006, v. 40, p.952-961.
35. Y. Hsu, T.M. Holsen. The Use of Receptor Models to Locate Atmospheric Pollutant Sources: PCBs in Chicago // <http://www.csu.edu/cers/documents>.

Статья поступила в редакцию 20.07.2011 г.

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ДЖЕРЕЛ ЗАБРУДНЕННЯ: ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ МЕТОДИ

М.Ф. Кожевнікова, В.В. Левенець, І.Л. Ролік

Подано результати огляду обчислювальних методів, які застосовуються для ідентифікації джерел забруднення. Показана необхідність їх використання для вивчення впливу атомної енергетики на екологічну ситуацію в Україні.

THE POLLUTION SOURCE IDENTIFICATION: COMPUTATIONAL APPROACH

M.F. Kozhevnikova, V.V. Levenets, I.L. Rolik

The results of computational approach review, which are used for pollution source identification, are presented. The necessity of its application for research of atomic power engineering effect on the ecological situation in Ukraine is showed.