

АНАЛИЗ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ ПРЕДПРИЯТИЯ ЦИРКОНИЕВОГО ЦИКЛА

М.Ф. Кожевникова¹, В.В. Левенец¹, К.А. Мец², И.Л. Ролик¹

¹*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина*

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

²*Вольногорский горно-металлургический комбинат, Вольногорск, Украина*

Представлен анализ распространения загрязняющих веществ в атмосфере, в районе расположения предприятия циркониевого цикла в Украине. Предлагается методика обработки данных по обнаружению источников загрязнения. Проведен анализ движения воздушных масс в районе г. Вольногорска Днепропетровской области, получены карты траекторий воздушных потоков и распределение в воздухе основных загрязняющих веществ на исследуемой территории.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время одной из наиболее актуальных проблем для оценки состояния и тенденций изменения загрязнения воздуха, почвы и водных объектов антропогенным воздействием является теоретическое и экспериментальное исследование пространственно-временного распределения загрязняющих веществ. Одним из главных направлений в охране окружающей среды является контроль техногенных выбросов газовых и аэрозольных примесей в атмосферу, который проводится с использованием методов математического моделирования на основе комплексного анализа протекающих гидрометеорологических процессов и процессов переноса примеси, дополнительных условий и ограничений.

В связи с необходимостью экологического контроля над выбросами загрязняющих веществ в атмосферу актуальной задачей является разработка методики для определения месторасположения вероятного источника загрязнения по соотношению загрязняющих веществ, содержащихся в замерах воздуха, взятых на рассматриваемой территории.

Для определения источников загрязнения используются 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 территориальное расположение аэрозольного загрязнения.

Обратные задачи нашли широкое применение при исследовании экологических проблем, касающихся качества воздуха. Модели качества воздуха используют математические и вычислительные технологии для моделирования физических и химических процессов, которые воздействуют на загрязнители воздуха, распространение их реакции в атмосфере. Одной из таких моделей является метод рецепторного моделирования (Receptor Modeling), который использует химические и физические характеристики газов и частиц, измеренные на источнике и рецепторе для идентификации

присутствия и определения вклада источника в концентрацию на рецепторе.

Целью работы является определение количественных характеристик загрязнения территории города предприятием циркониевого цикла, пространственного распределения загрязняющих веществ и отработка методики выявления источников загрязнения по результатам наблюдений состояния окружающей среды.

1. МЕТОДЫ ВЫЯВЛЕНИЯ ИСТОЧНИКОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ

При исследовании атмосферных процессов, учитывающих перенос и диффузию примесей в атмосфере, в большинстве методов используется численное моделирование. Одним из них является метод факторного анализа – PMF (Positive matrix factorization) [1], который применялся для выявления основных источников загрязнения для г. Вольногорска Днепропетровской области.

Положительное матричное разложение на множители (PMF) является инструментом многомерного факторного анализа. Происходит разложение матрицы данных об образце какого-либо вещества на две матрицы: вклады фактора и профили фактора, которые затем должны быть интерпретируемы аналитиком, для того чтобы сделать выводы о том, какие типы источников представлены, используя при этом информацию об измеренных профилях источников, анализ направления ветров и т. д. Метод кратко рассматривается в настоящей работе и описывается более детально в других статьях [2, 3].

Исходными данными для проведения вычислений являются концентрации веществ или элементов, содержащихся в исследуемых образцах. Основное уравнение для m химических веществ в n образцах от вклада p независимых источников может быть представлено следующим образом:

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

где x_{ij} – измеренная концентрация j -го соединения в i -м образце; f_{pj} – концентрация j -го соединения в

веществе, испускаемом p -м источником; g_{ip} – вклад p -го источника в i -й образец; e_{ij} – погрешность при вычислении, не содержащая значимой информации.

PMF существенно отличается от других методов факторного анализа. Все другие методы используют сингулярное разложение матрицы. PMF заключается в использовании метода наименьших квадратов для минимизации объектной функции Q , 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 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 этой проблемы разработано несколько подходов [4, 5]. Изложенный метод позволяет 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 [6]. Они основаны на анализе траекторий воздушных масс, переносящих загрязнения.

Для изучения пространственного распространения загрязняющих веществ использовалась программа HYSPLIT-4 (Hybride Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectories) [7], которая была разработана в лаборатории воздушных масс NOAA и в австралийском Бюро метеорологии. Эта программа позволяет осуществить моделирование процесса формирования и распространения облака воздушных загрязнений от заданного источника и объединяет два классических подхода – лагранжев и эйлеров (уравнения адвекции диффузии решаются независимо в лагранжевой постановке, а расчеты концентраций выполняются в рамках эйлерова подхода на фиксированной пространственной сетке).

Входные метеорологические данные, необходимые для HYSPLIT-4, заимствуются из расчетов метеорологических моделей, основанных на результатах натурных измерений.

2. ХАРАКТЕРИСТИКА ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЙ

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. ВГМК является градообразующим предприятием города и представляет собой основной источник влияния на его природную и социальную среду. Исходя из результатов, представленных в работах [8, 9], выбросы предприятия в атмосферу были выделены как основной негативный экологический фактор производства.

Всего из стационарных источников комбината в атмосферу попадают 16 загрязняющих веществ (таблица).

Выбросы загрязняющих веществ ВГМК

Название вещества	Выброс, т/год	Название вещества	Выброс, т/год
Азота диоксид	955.8	Водород фтористый	0.108
Аммиак	3.94	Марганец и его соединения	0.44
Ацетон	2.14	Сероводород	0.004
Бенз(а)пирен	0.000008	Серы диоксид	36.916
Бутилацетат	11.072	Углеводороды	122.28
Бутиловый спирт	3.1	Углерода оксид	596.16
Взвешенные вещества	551.16	Фенол	0.148
Водород хлористый	17.24	Формальдегид	0.02

Ранее нами производились исследования влияния данного производства на атмосферу и здоровье населения г. Вольногорска с использованием методологии оценки рисков для здоровья населения [10, 11].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для определения экологической ситуации в г. Вольногорске и оценки ее с помощью разных подходов были использованы результаты замеров воздуха, взятые в 36-ти точках города на протяжении 2004–2007 гг. Далее было произведено формирование массивов данных на основе вычисленных концентраций, определение погрешности измерений и недостающих данных. Обработка данных осуществлялась с помощью программы PMF v3.0.2.2. При этом были выявлены основные загрязняющие вещества, наблюдаемые в зоне исследований: Cl_2 (среднесуточное ПДК – $0,03 \text{ мг/м}^3$, 3 класс опасности), HCl (среднесуточное ПДК – $0,2 \text{ мг/м}^3$, 2 класс опасности), NO_2 (среднесуточное ПДК – $0,04 \text{ мг/м}^3$, 2 класс опасности). Основное негативное влияние на экологическую ситуацию в городе оказывает HCl . Присутствие в зоне наблюдения хлора может быть обусловлено аварийными выбросами и окислением хлористого водорода кислородом воздуха по реакции Дикона: $4HCl + O_2 = 2Cl_2 + 2H_2O$.

Для дальнейшей работы с помощью программы Arc View был осуществлен пространственный анализ распределения основных загрязняющих

веществ на территории г. Вольногорска методом интерполяции, для того чтобы наглядно увидеть, как изменилась экологическая обстановка по наличию этих загрязняющих веществ в 2004–2007 гг.

Использовался метод обратных взвешенных расстояний (IDW). Этот метод интерполяции предполагает, что каждая входная точка имеет влияние, убывающее с расстоянием. Чем ближе точка к обрабатываемой ячейке, тем больше ее вес. При определении выходного значения для каждой точки поверхности могут использоваться либо заданное число точек, либо все точки в пределах заданного радиуса. При использовании этого метода предполагается, что влияние переменной, по

которой ведется расчет, уменьшается при увеличении расстояния от исходной точки.

Были построены карты рассеивания основных загрязняющих веществ (Cl_2 , HCl и NO_2) в г. Вольногорске в 2004–2007 гг. В результате обработки информации выявлены основные очаги накопления загрязняющих веществ, влияющих на ухудшение экологической обстановки в городе. На рис. 1–2 приведено распространение Cl_2 и HCl в городе в 2005 году. На картах видно, что загрязнение воздуха этими веществами происходило в районе ВГМК, в южной и юго-западной частях города.

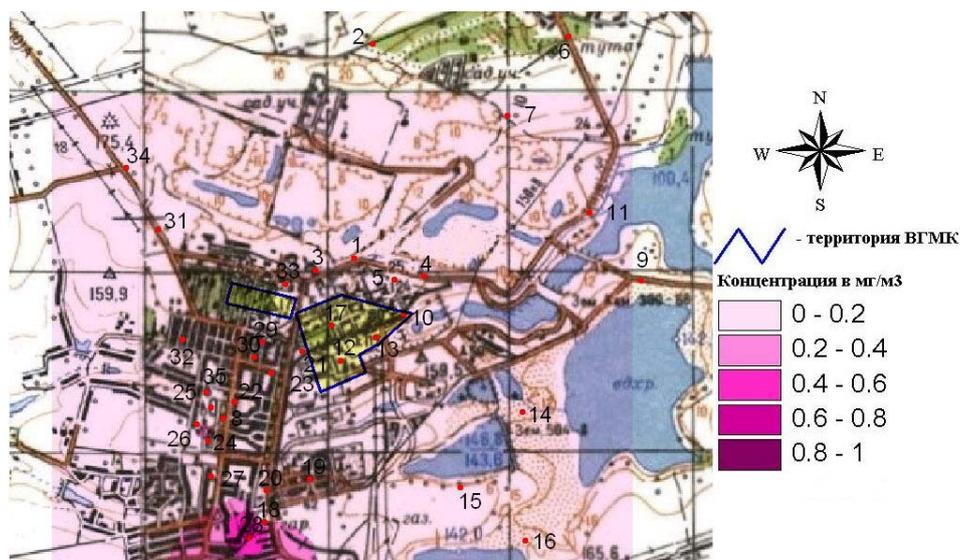


Рис. 1. Концентрация Cl_2

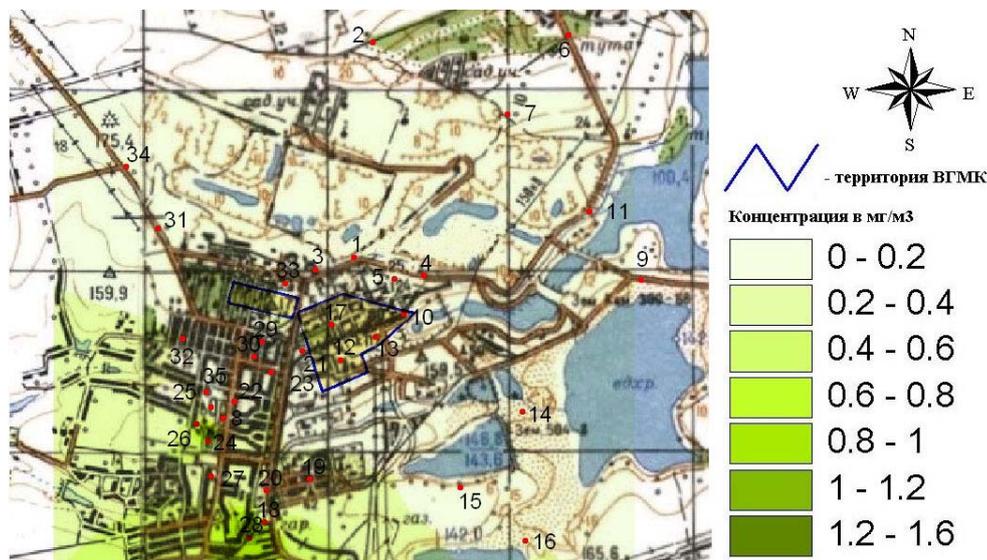


Рис. 2. Концентрация HCl

Для того чтобы убедиться, что наблюдаемое высокое содержание исследуемых веществ в приземном воздухе обусловлено антропогенным воздействием, было выполнено пространственное моделирование распределения хлора и хлористого водорода в воздушном бассейне г. Вольногорска, в

предположении о сосредоточении основного источника эмиссии на ВГМК. Территория города ограничена координатами: 48,4–48,6 с. ш. и 33,4–34,2 в. д. Для построения траекторий задавались географические координаты ВГМК. Траектории движения воздушных масс рассчитывались для

2004–2007 гг. с продолжительностью 120 ч на высотах 25, 100 и 500 м. В результате обработки данных выделены наиболее часто встречающиеся типы траекторий с учетом их направления и длины. Установлено, что в данном районе в основном преобладают восточный и северо-восточный заносы воздушных масс летом и осенью, а зимой и весной – юго-восточный и юго-западный. На рис. 3 представлена траектория движения воздушных масс в осенний период, полученная с помощью

программы HYSPLIT. Расчеты выполнялись при следующих параметрах: метеорологические данные – GDAS (Global Data Assimilation System), время работы – 120 ч, начальная дата запуска – 01.10.05, координаты источника – 48.49 с. ш. и 34.03 в. д., высота траектории – 100 м. Из этого рисунка видно, что загрязнение распространяется от предприятия на запад в сторону жилой части города и далее смещается на северо-запад Днепропетровской области.

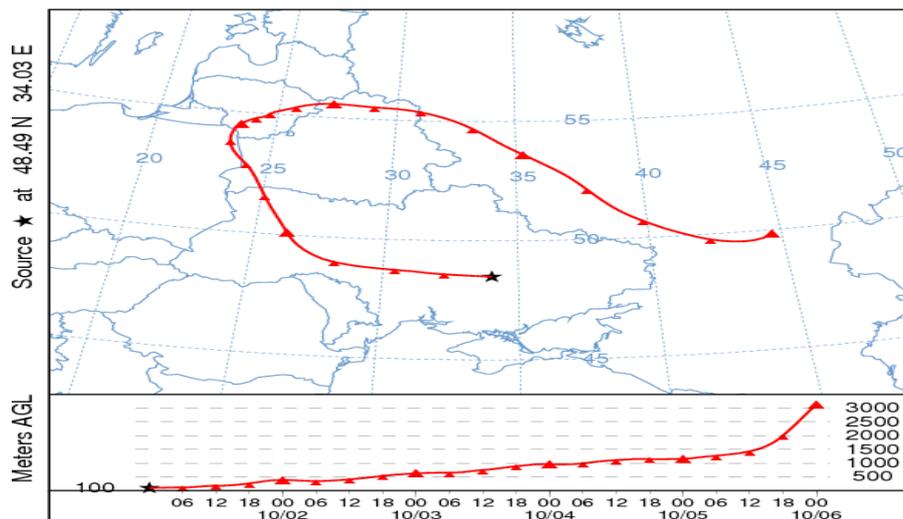


Рис. 3. Траектория движения воздушных масс от ВГМК, полученная 1 октября 2005 г. на высоте 100 м

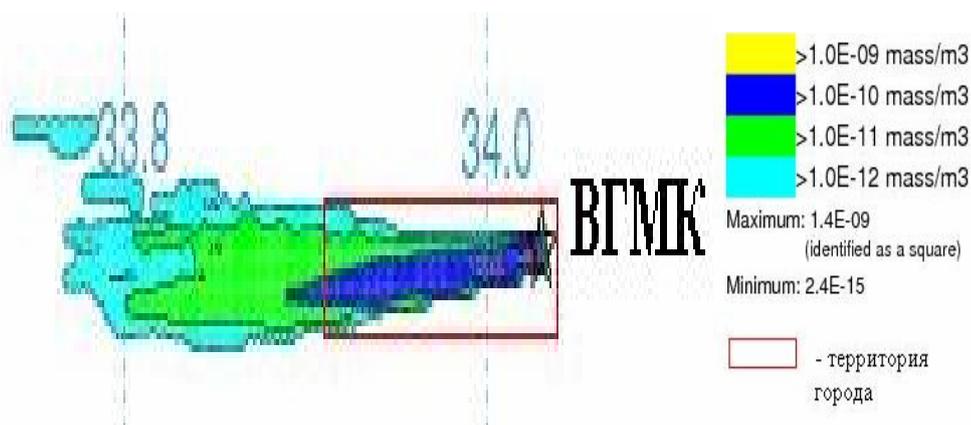


Рис. 4. Границы рассеивания HCl, полученные 1 октября 2005 г. на высоте 100 м

Для этих же траекторий были получены карты распространения загрязняющих веществ. На рис. 4, в частности, ситуация моделировалась для HCl. Модель распределения загрязнения запускалась при следующих параметрах: метеорологические данные – GDAS, время выброса – 8 ч, начальная дата запуска – 01.10.05, координаты источника – 48.49 с. ш. и 34.03 в. д., высота трубы источника – 20 м.

Таким образом, с помощью программы HYSPLIT были получены траектории движения воздуха в районе деятельности ВГМК, а также карты распределения основных загрязняющих веществ после выброса в атмосферу. В результате обработки был сделан вывод, что распространение загрязнения

воздуха от комбината происходит летом и осенью в западном и юго-западном направлениях, захватывая жилую часть города.

ВЫВОДЫ

Представлен анализ распространения загрязняющих веществ для предприятия циркониевого цикла в Украине.

В результате применения программы PMF v3.0.2.2 были выявлены основные факторы, влияющие на экологическую ситуацию в г. Вольногорске.

С помощью траекторной и дисперсионной моделей программы HYSPLIT получено пространственное распределение загрязняющих

веществ на изучаемой территории за 2004–2007 гг. и подтвержден факт, что ВГМК является основным источником загрязнения для г. Вольногорска.

Таким образом, предложенный подход позволяет идентифицировать источник загрязнения по проведенным измерениям концентрации загрязнителей.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. P.K. Hopke. Recent developments in receptor modeling // *Journal of Chemometrics*. 2003, v. 17, p. 255-265.
2. P.K. Hopke. *Receptor Modeling in Environmental Chemistry*. New York: Wiley, 1985.
3. P.K. Hopke. *Receptor Modeling for Air Quality Management*. Amsterdam: Elsevier, 1991.
4. P. Paatero. Least squares formulation of robust, nonnegative factor analysis // *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 1997, v. 37, p. 23-35.
5. 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.
6. 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.

7. Ronald R. Draxler, G.D. Hess. *Description of The HYSPLIT-4 Modeling System*. Silver Spring: Air resources Laboratory, NOAA Technical Memorandum ERL ARL-224, 1997, p.1-22.

8. В.М. Ажажа, И.Л. Ролик, М.Ф. Кожевникова, В.В. Левенец, А.А. Щур. Экологическая характеристика производства циркония, его сплавов и проката для ядерного топливного цикла Украины // *Научно-производственный журнал «Экология и промышленность»*. 2007, №4, с. 44-50.

9. В.В. Левенец, И.Л. Ролик, К.А. Мец. Оценка риска при воздействии выбросов в атмосферу Вольногорского горно-металлургического комбината // *Научно-производственный журнал «Экология и промышленность»*. 2009, №3, с. 83-89.

10. В.В. Левенец, И.Л. Ролик. Метод выражения специфических и неспецифических ингаляционных рисков в единых показателях // *Вестник НТУ ХПИ*. 2010, №69, с. 78-83.

11. М.Ф. Кожевникова, В.В. Левенец, И.Л. Ролик. Программная реализация метода оценки риска от загрязнения атмосферного воздуха выбросами химического производства // *Вестник НТУ ХПИ*. 2009, №24, с. 164-171.

Статья поступила в редакцию 10.04.2013 г.

АНАЛІЗ ПОШИРЕННЯ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН ДЛЯ ПІДПРИЄМСТВА ЦИРКОНІЄВОГО ЦИКЛУ

М.Ф. Кожевникова, В.В. Левенець, К.А. Мець, І.Л. Ролік

Представлено аналіз поширення забруднюючих речовин в атмосфері, в районі розташування підприємства цирконієвого циклу в Україні. Пропонується методика обробки даних по виявленню джерел забруднення. Проведено аналіз руху повітряних мас у районі м. Вільногірська Дніпропетровської області. Отримано карти траєкторій повітряних потоків і розподіл у повітрі основних забруднюючих речовин на досліджуваній території.

THE SPREAD ANALYSIS OF POLLUTANTS FOR ZIRCONIUM CYCLE COMPANY

M.F. Kozhevnikova, V.V. Levenets, K.A. Mets, I.L. Rolik

The spread analysis of pollutants in the atmosphere above location area of the zirconium cycle company in Ukraine is presented. It is proposed the data processing method for the pollution source detection. An analysis of the air mass movement above the industrial area of Volnohirska in Dnipropetrovsk region was performed. The air flow path maps and the distribution of major pollutants on the study area were obtained.