

На правах рукописи



ПАНЧЕНКО АЛИНА АЛИКОВНА

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ УРОВНЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ВОЗДУШНОГО
БАССЕЙНА ГОРОДА С РАЗВИТОЙ ХИМИЧЕСКОЙ И
НЕФТЕХИМИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТЬЮ (НА ПРИМЕРЕ Г.
СТЕРЛИТАМАК РЕСПУБЛИКИ БАШКОРТОСТАН)**

Специальность 03.02.08 – Экология (в химии и нефтехимии)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Уфа 2018

Работа выполнена на кафедре «Прикладная экология» ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет».

Научный руководитель: **Сафаров Айрат Муратович**
доктор технических наук,
ФГБОУ ВО «Уфимский государственный
нефтяной технический университет» / кафедра
«Прикладная экология», доцент

Официальные оппоненты: **Тунакова Юлия Алексеевна**
доктор химических наук, профессор
ФГБОУ ВО «Казанский национальный
исследовательский технический университет
имени А.Н. Туполева – КАИ» / кафедра
«Общая химия и экология», заведующий
кафедрой

Шайхутдинова Анастасия Анатольевна
кандидат технических наук,
ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный
университет» / кафедра экологии и
природопользования, старший преподаватель

Ведущая организация: Институт проблем экологии и
недропользования Академии наук Республики
Татарстан (ИПЭН АН РТ, г. Казань)

Защита состоится 19 сентября 2018 г. 14.00 на заседании диссертационного совета Д 212.289.03 при ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» по адресу: 450062, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» и на сайте www.rusoil.net.

Автореферат разослан ____ 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Абдульминев Ким Гимадиевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследований

Обеспечение сбалансированных решений социально-экономических задач, таких как сохранение благоприятной окружающей среды и укрепление правопорядка в области охраны окружающей среды совместно с соблюдением экономических интересов, как предприятий, так и всего населения в целом, требует целенаправленного научного подхода. В последние десятилетия наблюдается все более тесная взаимосвязь развития экономики с изменениями в окружающей среде, возрастает взаимное влияние как экологии на экономическое развитие, так и результатов хозяйственной деятельности на состояние природной среды.

В условиях постоянно ухудшающейся экологической обстановки, особенно в период действия неблагоприятных метеорологических условий, научные основы управления антропогенным воздействием, многофакторный анализ формирования уровня загрязнения в сочетании с оперативным прогнозом уровня загрязнения воздушного бассейна в промышленных центрах – это единственно комфортное решение для человека, создавшего урбанизированную среду, и самой среды обитания.

Степень разработанности темы

В опубликованных работах по оценке и прогнозу уровня загрязнения атмосферы (Т.А. Костарева, В.Г. Свинухов, В.А. Аллянова и др.) основное внимание уделялось анализу динамики загрязнения, количественной оценке тесноты связи уровня загрязнения воздуха с различными метеорологическими, антропогенными факторами. Вопросы краткосрочного прогнозирования сводились к определению значения интегрального параметра, являющегося вероятностной характеристикой превышения концентраций, измеренных в течение дня на стационарных постах наблюдения за состоянием атмосферного воздуха. Краткосрочному же прогнозу содержания конкретных поллютантов в атмосферном воздухе, требующему системных данных и исследований среднесуточных концентраций химических веществ в воздухе, внимание не уделялось.

Соответствие научной специальности

Тема диссертации соответствует паспорту специальности 03.02.08: принципы и механизмы системного экологического мониторинга, аналитического контроля в химической и нефтехимической отраслях промышленности (п. 4.3).

В данной диссертационной работе в качестве **объекта исследования** был выбран воздушный бассейн г. Стерлитамак, где расположено множество предприятий химического и нефтехимического профиля. Стерлитамак зачастую фигурирует в приоритетном списке городов с наибольшим уровнем загрязнения атмосферного воздуха.

Сложная экологическая обстановка здесь привела к необходимости изучения и оценки негативного воздействия промышленности и автотранспорта на окружающую среду и ставит задачу принятия оперативных решений для снижения негативного воздействия антропогенных выбросов на окружающую среду, что является возможным на основе краткосрочного прогноза загрязнения атмосферы.

Цель работы

Создание модели краткосрочного прогнозирования превышения допустимых нагрузок на атмосферный воздух на основе оценки уровня загрязнения воздушного бассейна города с развитой химической и нефтехимической промышленностью (г. Стерлитамак).

В работе предстояло решить следующие **задачи**:

1 На основе данных мониторинга воздушного бассейна г. Стерлитамака в период с 2001 - 2016 гг. выявить основные примеси в атмосферном воздухе г. Стерлитамака и провести анализ пространственной, сезонной и многолетней изменчивости их содержания.

2 Установить причины, способствующие формированию уровня загрязнения воздушного бассейна города специфическими для предприятий химической и нефтехимической промышленности загрязняющими веществами.

3 Определить токсичность проб снежного покрова, отобранных по всей территории города с учетом размещения источников загрязнения и орографических характеристик, для оценки уровня загрязнения воздуха.

4 Исследовать возможность применения нейронных сетей как для краткосрочного прогнозирования уровня загрязнения атмосферного воздуха г. Стерлитамака по отдельным загрязняющим веществам, так и для оценки уровня

загрязнения воздуха в любой точке города Стерлитамака. Испытать различные типы нейронных сетей и алгоритмы их обучения с целью разработки наиболее адекватных моделей, описывающих загрязнение атмосферного воздуха.

5 Разработать технические решения по программной реализации полученных нейросетевых моделей для поддержки принятия оперативных природоохранных мероприятий.

Научная новизна

1 Разработаны модели, являющиеся основой для краткосрочного прогноза содержания специфических загрязняющих веществ в воздухе г. Стерлитамак, на базе нейронных сетей различного вида (точность прогноза для отдельных веществ составляет до 74 %).

2 Разработана модель, позволяющая определять уровень загрязнения воздуха в любой точке города, на базе рекуррентной нейронной сети Элмана (точность модели – до 86 %).

3 Впервые для города Стерлитамак исследован и количественно оценен метеорологический инерционный фактор, который в значительной мере влияет на формирование уровня загрязнения воздушного бассейна города.

4 Установлены основные закономерности динамики содержания поллютантов в атмосферном воздухе города: полугодовая цикличность загрязнения атмосферы оксидом серы, углеродом и бенз(а)пиреном; наличие повышающего тренда в ряду: бензол, оксиды азота, толуол, фенол, формальдегид, этилбензол, сероводород; существенный вклад случайной составляющей для аммиака, трихлорметана, гидрохлорида, четыреххлористого углерода и пыли.

Теоретическая и практическая значимость

1 Анализ динамики загрязнения атмосферного воздуха г. Стерлитамак за многолетний период позволил установить основные ее тенденции и наиболее опасные метеорологические явления с точки зрения формирования уровня загрязнения воздушного бассейна города, указанное имеет важное значение в принятии решений о введении режима ограничения работы промышленных предприятий при неблагоприятных метеорологических условиях.

2 Выявленные пространственные и временные закономерности распределения загрязненных воздушных масс по территории г. Стерлитамак, результаты влияния на качество атмосферного воздуха антропогенных выбросов и абиотических факторов, контролирующего потенциал загрязнения атмосферы

являются важными в работе по установлению наиболее благоприятных для проживания районов города.

3 Разработана компьютерная программа для выполнения практических расчетов индекса загрязнения воздуха в любой точке города на базе модели рекуррентной сети Элмана, обученной методом градиентного спуска с учетом моментов и адаптивным обучением.

4 Разработана компьютерная программа выполнения практических расчетов уровня загрязнения воздуха аммиаком (его модели показала наилучший результат) на базе модели многослойной нейронной сети прямого распространения, обученной методом Пауэлла-Биеле.

Результаты научных исследований используются в повседневной деятельности Стерлитамакского территориального управления Министерства природопользования и экологии Республики Башкортостан, Администрации городского округа г. Стерлитамак, высших учебных заведений города, на крупных промышленных предприятиях.

Методология и методы исследования

В работе использованы данные среднемесячных концентраций, полученных по данным стационарных постов наблюдения гидрометцентра республики Башкортостан за состоянием атмосферного воздуха за последние 15 лет. Для проведения работ по прогнозированию загрязнения воздуха г. Стерлитамак использованы среднесуточные концентрации, зарегистрированные автоматизированными станциями контроля атмосферного воздуха. Для оценки уровня загрязнения воздуха по всей территории города проведена работа по сбору и определению данных о токсичности проб снежного покрова. Отбор проб снежного покрова проводили с учетом размещения источников загрязнения в соответствии с требованиями нормативной документации (ГОСТ, ГОСТ Р и РД).

Химико-аналитические и экотоксикологические исследования выполнялись на базе аккредитованной лаборатории с использованием комплекса современных аналитических методов, в соответствии с общепринятыми методиками.

Методологию диссертационного исследования составили подходы, концепции, методы и алгоритмы эконометрики, математической статистики, систем искусственного интеллекта и других математических инструментариев. При решении конкретных задач использовались известные и хорошо опробованные методы регрессионного анализа, статистические методы оценки

значимости параметров моделей, методы построения искусственных нейронных сетей.

Положения, выносимые на защиту

1 Результаты комплексного анализа техногенного воздействия на качество атмосферного воздуха г. Стерлитамак за последние 15 лет; значимые факторы, определяющие уровень загрязнения воздуха селитебной зоны.

2 Специфика и особенности динамики загрязнения атмосферного воздуха г. Стерлитамак.

3 Результаты площадных исследований территории с целью оценки пространственного и временного распределения загрязняющих примесей.

4 Нейросетевые модели для краткосрочного прогноза загрязнения атмосферного воздуха города и для определения уровня загрязнения воздуха в пределах городской территории.

Апробация работы

Результаты исследований были доложены и обсуждены на: Всероссийской научной конференции «Инновационные технологии в области химии и биотехнологии» (г. Уфа, 2012 г.), Всероссийской научно-практической конференции «Малоотходные, ресурсосберегающие химические технологии и экологическая безопасность» (г. Стерлитамак, 2013 г.), Всероссийской научно-технической конференции «Фундаментальные и прикладные исследования в технических науках в условиях перехода на импортозамещение» (г. Стерлитамак, 2015 г.), 20-й Международной Пущинской конференции молодых ученых «Биология – наука 21 века» (г. Пущино, 2016 г.).

Публикации

По теме диссертационной работы опубликовано 13 работ, в том числе 2 статьи в научных журналах, входящих в перечень ведущих рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК РФ, а также 1 статья в зарубежном журнале, включенном в международные реферативные базы данных и системы цитирования Scopus и Web of Science.

Личный вклад автора заключается в непосредственном участии в формулировке цели и задач исследования, проведении исследований, анализе деятельности предприятий химических и нефтехимических отраслей промышленности, расположенных в регионе, разработке нейросетевых моделей

прогнозирования загрязнения воздуха, разработке компьютерных программ, обсуждении результатов работы и ее апробации.

Структура работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованной литературы и трех приложений. Работа включает 154 страницы машинописного текста, 28 рисунков, 38 таблиц; список использованной литературы содержит 114 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность работы, сформулированы цель и основные задачи, определены научная новизна и практическая значимость результатов проведенных исследований.

Первая глава посвящена обзору литературы по теме исследования. В разделе 1.1 рассмотрено загрязнение атмосферного воздуха как многофакторный процесс. Здесь важно отметить, что некоторые из факторов, влияющих на концентрацию примесей в атмосферном воздухе, трудно охарактеризовать количественно. К ним относятся градиент температур по высоте, наличие «острова тепла», степень термодинамической устойчивости атмосферы и др. Помимо этого, имеют место случайные события: в условиях города наблюдаются неблагоприятные метеорологические условия, способствующие накоплению выбросов промпредприятий и транспорта в воздухе.

В опубликованных работах по оценке и прогнозу уровня загрязнения атмосферы (Т.А. Костарева, В.Г. Свинухов, В.А. Аллянова) основное внимание уделялось анализу динамики загрязнения, количественной оценке тесноты связи уровня загрязнения воздуха с различными метеорологическими, антропогенными факторами. Вопросы краткосрочного прогнозирования сводились к определению значения интегрального параметра, являющегося вероятностной характеристикой превышения концентраций, измеренных в течение дня на стационарных постах наблюдения за состоянием атмосферного воздуха. Краткосрочному же прогнозу содержания конкретных поллютантов в атмосферном воздухе, требующему системных данных и исследований среднесуточных концентраций химических веществ в воздухе, внимание не уделялось. Несмотря на наличие исследований по анализу и оценке загрязненности атмосферного воздуха, снежного покрова

разных городов (гг. Москва, Оренбург, Благовещенск, Барнаул, Волгоград, Муром, Кемерово, Казань и др.), во многих регионах России с учетом индивидуальности региональных особенностей, связанных со своеобразием инфраструктуры производств, физико-географическим положением, разнообразием климатических, орографических условий и др., изучение рассматриваемой проблемы и поиск путей её разрешения в каждом конкретном промышленном регионе является достаточной актуальной задачей.

В разделе 1.2 приводится обзор существующих моделей для прогнозирования содержания загрязняющих веществ в атмосферном воздухе. Анализ моделей показал, что традиционные модели невозможно использовать для экологического прогностического моделирования, где действует множество не формализуемых и малоизученных факторов, исходная информация часто бывает неточной и неполной, а лицо, принимающее решения, оперирует качественными оценками исследуемых объектов. В связи с этим актуален поиск наиболее результативного метода, который позволит сделать краткосрочный прогноз состояния воздушного бассейна с высокой точностью. Для этого необходимо определиться с наличием и количественной оценкой всех данных, на основе которых планируется создать прогностические модели.

Вторая глава посвящена оценке существующего состояния воздушного бассейна г. Стерлитамака.

Коэффициент самоочищения атмосферы г. Стерлитамак, среднемноголетнее значение которого составило 0,33, характеризует условия города, как относительно неблагоприятные для самоочищения. В работе исследовано влияние метеоусловий на загрязнение атмосферного воздуха, по результатам показано, что наибольшее влияние оказывают температурный режим, скорость и направление ветра, режим ограничения работы промышленных предприятий – коэффициенты корреляции составили 0,4 - 0,6.

Наконец, для некоторых веществ обнаружен и количественно оценен метеорологический инерционный фактор, в значительной степени влияющий на формирование уровня загрязнения воздушного бассейна города (таблица 1).

С учетом данного фактора являются объяснимыми явления повышенного загрязнения воздуха даже после отмены действия неблагоприятных метеоусловий.

Таблица 1 – Расчет степени влияния метеорологического инерционного фактора на формирование уровня загрязнения атмосферного воздуха

Загрязняющее вещество	Коэффициент корреляции	Классификация по Чеддоку	Доверительный интервал
Пыль	0,94	Весьма высокая	0,92; 0,97
Формальдегид	0,71	Высокая	0,55; 0,77
Оксид углерода	0,67	Заметная	0,56; 0,78
Диоксид азота	0,66	Заметная	0,55; 0,77
Фенол	0,66	Заметная	0,55; 0,77

Все вышеуказанные факторы являются причиной частых превышений содержания загрязняющих веществ в воздушном бассейне города. В связи с этим особо важными являются задачи контроля концентраций загрязняющих веществ и прогноз состояния воздушного бассейна. Существует много методов для прогнозирования, однако практически все из них громоздки и требуют четких количественных оценок всех входных данных. Вместе с тем, известно, что не все факторы, формирующие загрязнение воздушного бассейна города, можно обнаружить и оценить количественно. В связи с этим необходимо изучить многолетнюю динамику загрязнения атмосферного воздуха города и установить степень влияния на загрязнение скрытых и неизученных факторов. В решении поставленной задачи успешно зарекомендовал себя анализ временных рядов.

В третьей главе исследована динамика загрязнения воздушного бассейна города г. Стерлитамак за последние 15 лет.

С использованием анализа временных рядов данных мониторинга воздушного бассейна г. Стерлитамак установлен вклад детерминированной, сезонной и случайной компонент для различных веществ (таблица 2).

Вклад трендовой составляющей достигает в некоторых случаях 34 %, что объясняется специфичностью технологических процессов, применяемых на промышленных предприятиях, постоянное присутствие загрязняющих веществ в атмосферном воздухе города. Вклад случайных составляющих колеблется от 35 до 80 %, что обусловлено неравномерностью технологических процессов во времени, влиянием неблагоприятных метеоусловий, залповых и аварийных выбросов. Наконец, вклад сезонной составляющей в общий уровень загрязнения воздушного бассейна в отдельных случаях достигает 49 %.

Таблица 2 – Результаты анализа временных рядов для различных веществ

Вещество	Вклад, %		
	Трендовая составляющая	Сезонная составляющая	Случайная составляющая
Пыль	0,51	48,91	50,59
Диоксид серы	4,35	43,43	52,22
Оксид углерода	3,78	47,18	49,03
Диоксид азота	1,93	48,31	49,76
Оксид азота	9,87	39,87	50,26
Сероводород	5,38	44,81	49,81
Фенол	3,12	45,89	50,99
Хлорид водорода	4,30	46,70	49,00
Аммиак	0,82	48,28	50,91
Формальдегид	7,96	45,29	46,75
Бензол	33,68	31,10	35,23
Толуол	25,85	34,21	39,95
Этилбензол	9,07	38,19	52,74
ЧХУ	1,94	43,52	54,54
Трихлорметан	6,59	12,96	80,45
Бенз(а)пирен	2,37	48,78	48,86

По выявленным закономерностям во временных рядах веществ предложена классификация загрязняющих атмосферный воздух веществ – выделены три группы:

- к первой группе относятся бензапирен, диоксид серы и оксид углерода: установлено наличие циклических колебаний временных рядов с шагом, равным шести месяцам. Наличие цикла связано с тем, что в зимний период заметно увеличивается выброс этих загрязняющих веществ от теплоэлектростанций, автотранспорта (затрачивается время на прогрев двигателя, используется «зимнее» топливо, скорость химических превращений), то есть, летний и зимний периоды оказывают влияние на величину концентрации в воздухе этих показателей;

- ко второй группе относятся бензол, оксиды азота, толуол, фенол, формальдегид, этилбензол, сероводород. Тут можно говорить лишь о наличии повышающего тренда временных рядов, наметившегося за последние 10 лет;

- к третьей группе относятся аммиак, трихлорметан, гидрохлорид, четыреххлористый углерод, взвешенные вещества. Их автокорреляционная

функция свидетельствует об отсутствии какой-либо циклической зависимости: влияние на их уровень оказывают случайные события (периодические процессы, залповые и аварийные выбросы, неблагоприятные метеорологические условия и др.).

Полученная классификация загрязняющих атмосферный воздух веществ позволяет оценивать динамику их присутствия в атмосфере, а также принимать обоснованные административные решения в области экологической безопасности, например, рекомендовать включать в план мероприятий в период НМУ обязательное снижение выбросов 3 группы веществ.

Кроме того, проведенное исследование показывает, что вклад случайной компоненты в структуру временных рядов велик, а, значит, многие скрытые факторы, влияющие на уровень загрязнения воздуха в городе, невозможно использовать в существующих моделях прогнозирования, которые четко требуют количественных оценок предикторов.

При таких условиях использование в задачах прогнозирования уровня загрязнения воздуха моделей на основе нейронных сетей, которые способны учитывать скрытые зависимости, представляется наилучшим вариантом. Что же касается самих рассмотренных временных рядов, то они в таком случае ложатся в основу формирования выборок для обучения и тестирования нейронных сетей.

В четвертой главе исследована возможность прогнозирования содержания загрязняющих веществ в атмосферном воздухе г. Стерлитамак с использованием искусственных нейронных сетей.

В работе была спроектирована нейросетевая модель прогнозирования содержания специфических для города Стерлитамака загрязняющих веществ (пыль, аммиак, сероводород, фенол, винилхлорид, диоксид азота) в атмосферном воздухе с заблаговременностью до нескольких суток в зависимости от метеорологических характеристик в последующие дни. В связи с тем, что был установлен существенный вклад инерционного фактора в загрязнение атмосферы, модель разрабатывалась с учетом него.

В рамках исследований были апробированы нейронная сеть прямого распространения, каскадная сеть прямого распространения, сеть Элмана, обобщенная регрессионная сеть, радиальная базисная сеть с минимальным числом нейронов, радиальная базисная сеть с нулевой ошибкой.

Также были апробированы различные алгоритмы обучения нейронных сетей: Пауэлла-Биеле, Левенберга - Марквардта, регуляризация Bayesian и другие, с оценкой адекватности нейросетевой модели прогнозирования на базе обученной конкретным алгоритмом нейронной сети конкретного типа.

Сводные результаты по оценке адекватности модели прогнозирования по всем шести специфическим веществам для различных видов нейронных сетей и их алгоритмов представлены в таблицах 3 и 4.

В рамках исследований дополнительно была проведена работа по определению оптимального количества нейронов в скрытых слоях, однако, вариация количества нейронов в скрытых слоях не привела к существенному изменению качества нейросетевой модели.

Наилучшие результаты дали модели для аммиака, оксида азота и винилхлорида.

Таблица 3 – Оценка адекватности моделей прогнозирования на базе различных типов нейронных сетей для шести специфических в г. Стерлитамак загрязняющих атмосферный воздух веществ

Вещества Типы сетей	Аммиак	Диоксид азота	Фенол	Пыль	Серово- дород	Винил- хлорид
Каскадная сеть (trainlm)	0,69282	0,744881	0,590713	0,313183	0,515006	0,684053
Сеть Элмана (traingdx)	0,710266	0,513566	0,455591	0,229459	0,323003	0,692153
Сеть прямого распространения (trainlm)	0,73106885	0,740274	0,638868	0,283538	0,498969	0,675925
Обобщенно регрессионная сеть	0,144676	0,141757	0,207119	-0,03058	0,019318	0,354318
Радиально базисная сеть	$1,32 \cdot 10^{-34}$	0,0179	0,00986	-0,0435	0,0356	0,207
Радиально базисная сеть с нулевой ошибкой	$-3,75 \cdot 10^{-48}$	$-2,06 \cdot 10^{-34}$	$1,96 \cdot 10^{-37}$	$-3,47 \cdot 10^{-33}$	$7,52 \cdot 10^{-34}$	$-4,26 \cdot 10^{-36}$

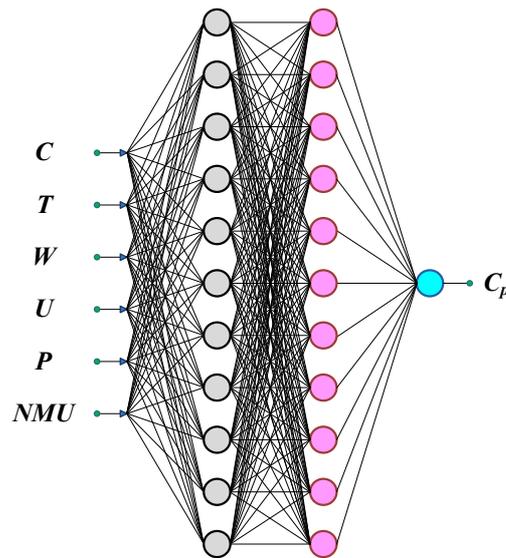
Таблица 4 – Оценка результатов оценки адекватности модели на базе нейронной сети прямого распространения при различных алгоритмах обучения для специфических в г. Стерлитамак загрязняющих воздух веществ

Вещества Алгоритм Обучения	Аммиак	Диоксид азота	Фенол	Пыль	Серово- дород	Винил- хлорид
Метод градиентного спуска (GD)	0,20803677	0,03793415	0,638868	0,12883501	0,097962555	0,61584171
Метод градиентного спуска с адаптивным обучением (GDA)	0,67079645	0,331623	0,262954	0,10554702	0,141770953	0,692153
Метод градиентного спуска с учетом моментов и с адаптивным обучением (GDX)	0,16592998	0,62429448	0,221178	0,10099377	0,298828808	0,53639753
Регуляризация Bayesian (BR)	0,70175846	0,744881	0,526654	0,26081580	0,476114375	0,4910889
Метод Левенберга- Марквардта (LM)	0,43965664	0,71015476	0,497423	0,313183	0,515006	-
Метод упругого обратного распространения (RP)	0,70559287	0,00899709	0,318494	0,23970681	0,225898936	-
Метод связанных градиентов Пауэлла – Биеле СGB	0,73106885	0,04042522	0,264613	0,18839479	0,276593019	-
Квази- Ньютоновский метод (BFG)	0,72108839	0,57232027	0,090442	0,07132741	0,360593448	-

Так, для вещества аммиак наилучшая адекватность нейросетевой модели прогнозирования достигается (до 73 %) при использовании нейронной сети прямого распространения с алгоритмом обучения Пауэлла-Биеле (таблицы 3, 4).

На рисунке 1 представлен итоговый вариант топологии нейронной сети для вещества аммиак.

Для оксида азота наилучшая адекватность нейросетевой модели прогнозирования достигается (до 74 %) при использовании каскадной нейронной сети прямого распространения с алгоритмом обучения регуляризации Bayesian. (таблицы 3, 4). Топология нейронной сети представлена на рисунке 2.



C – текущее значение концентрации загрязняющего вещества; T – температура воздуха; W – направление ветра; U – скорость ветра; P – атмосферное давление; NMU – режим неблагоприятных метеоусловий; C_p – прогнозируемое значение концентрации загрязнителя

Рисунок 1 – Топология нейросетевой модели краткосрочного прогноза содержания аммиака на базе многослойной нейронной сети

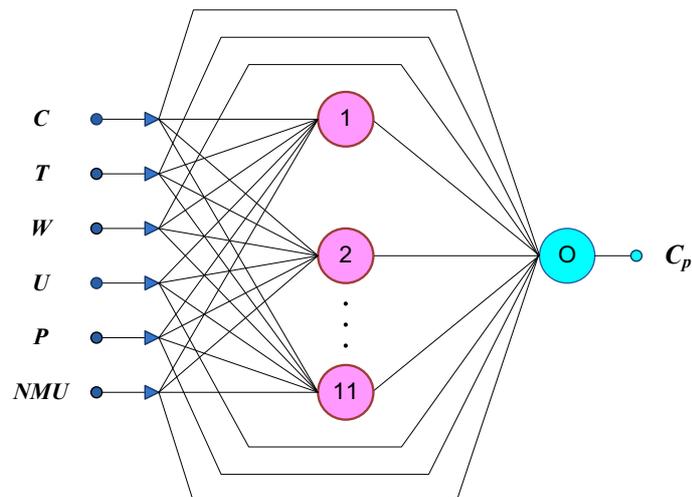


Рисунок 2 – Топология нейросетевой модели краткосрочного прогноза содержания диоксида азота на базе каскадной нейронной сети

Для вещества винилхлорид наилучшая адекватность нейросетевой модели прогнозирования достигается (до 64 %) при использовании рекуррентной нейронной сети Элмана с алгоритмом обучения метод градиентного спуска с адаптивным обучением (таблицы 3, 4). Топология нейронной сети представлена на рисунке 3.

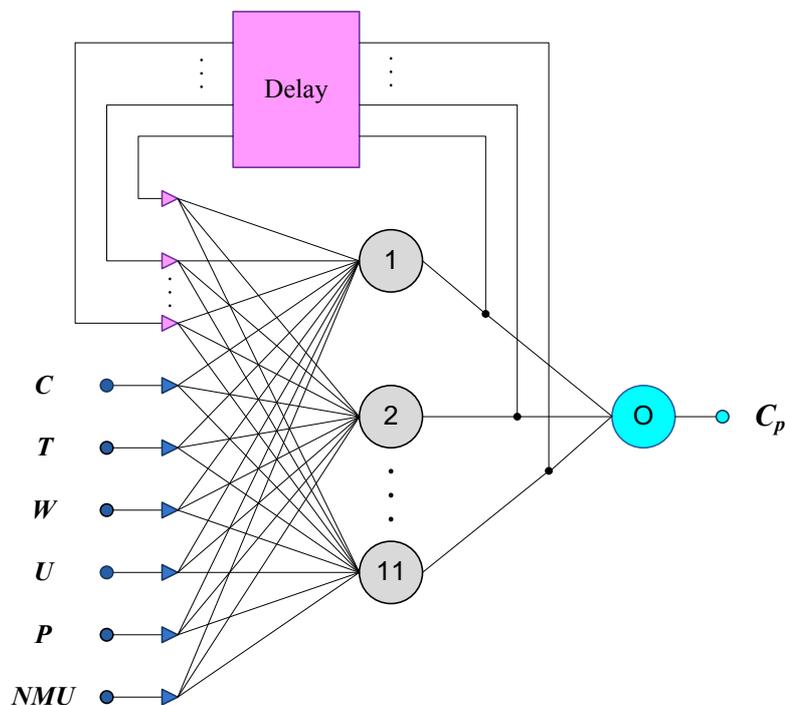


Рисунок 3 – Топология нейросетевой модели краткосрочного прогноза содержания винилхлорида на базе рекуррентной нейронной сети Элмана

Для возможности использования разработанных нейросетевых моделей в практических расчетах уровня загрязнения воздуха разработана программа в математической среде MatLab со встроенным пакетом Neural Networks Toolbox, интерфейс которой представлен ниже на рисунке 4.

Математическим «ядром» программы является экспортированная из MatLab обученная нейронная сеть, которая и используется как ключевой блок обработки входных значений и расчета результата.

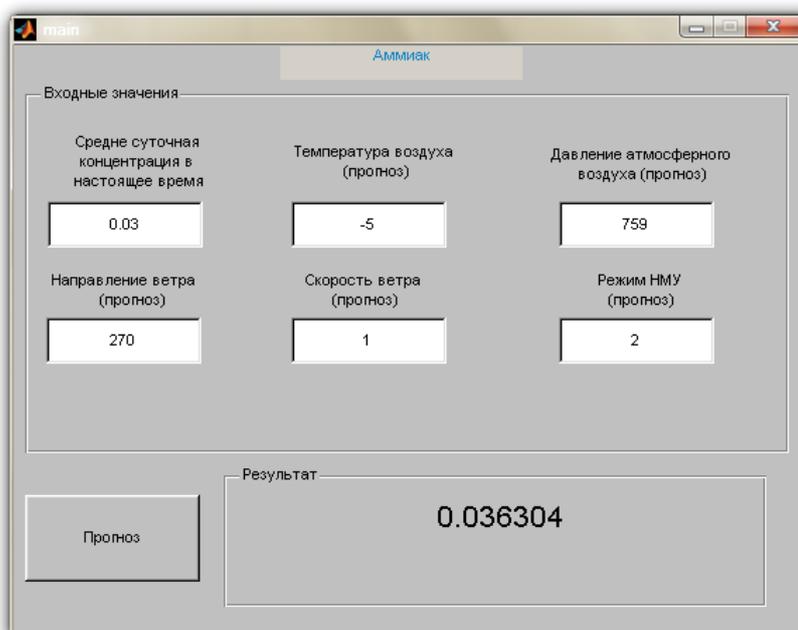


Рисунок 4 – Окно программы для расчета уровня загрязнения атмосферного воздуха на основе нейронной сети

Пятая глава посвящена исследованию пространственного распределения загрязнения в воздушном бассейне по всей территории г. Стерлитамак на основе данных мониторинга снежного покрова города как депонирующего индикатора загрязнения атмосферного воздуха. С учетом того, что химический состав снежной пробы урбанизированной территории достаточно разнообразен, полный селективный анализ загрязнителей снега будет весьма дорог и трудоемок. В таком случае показательным и относительно недорогим является метод биотестирования снежных проб. В качестве тест-объекта выбраны дафнии магна (*Daphnia magna Straus*), так как эти виды без особых трудностей выращиваются в лабораторных условиях и имеют короткий жизненный цикл, позволяющий проследить последствия токсического воздействия (в малых концентрациях) на протяжении ряда поколений, и растения кресс-салата сорта «Данский» (*Lepidium sativum L.*), так как он не требует особого ухода, непривередлив, что позволяет легко выращивать его в лабораторных условиях.

Результаты исследований показали, что превышение показателей фоновых значений зафиксированы повсеместно. Худшие показатели получены в пробах,

отобранных на дорожных перекрестках, на участках с интенсивным движением автотранспорта, на территории санитарно-защитной зоны промышленных предприятий.

Результаты математической обработки данных, полученные в ходе всего исследования, позволили количественно оценить тесноту связи и подтвердили значимость воздействия на результаты таких показателей, как интенсивность движения транспортных средств на автодорогах г. Стерлитамак, показателя индекса загрязнения данных постов контроля загрязнения атмосферного воздуха г. Стерлитамак, орографические характеристики (таблицы 5 - 7).

Таблица 5 – Результаты анализа связи экотоксикологических характеристик и интенсивности движения транспортных средств на автодорогах г. Стерлитамак

Показатель	всхожесть семян кресс-салата	всхожесть семян кресс-салата, инокулированных <i>Bacillus subtilis</i>	показатель выживаемости дафний	выживаемость дафний в пробах, инокулированных <i>Bacillus subtilis</i>
Коэффициент корреляции	-0,73	0,29	-0,90	-0,79
Коэффициент детерминации	0,52	0,08	0,81	0,62

Таблица 6 – Результат анализа связи экотоксикологических характеристик с показателями индекса загрязнения данных постов контроля загрязнения о воздуха г. Стерлитамак

Показатель	всхожесть семян кресс-салата	всхожесть семян кресс-салата, инокулированных <i>Bacillus subtilis</i>	показатель выживаемости дафний	выживаемость дафний в пробах, инокулированных <i>Bacillus subtilis</i>
Коэффициент корреляции	0,95	-0,73	-0,97	-0,91
Коэффициент детерминации	0,91	0,53	0,95	0,82

Результаты исследований показали высокую значимость таких связей. Статистический анализ временного ряда данных не подтвердил их годовую изменчивость, что обусловлено постоянством поступления объемов выбросов в атмосферу. Указанное обстоятельство позволило использовать временные ряды

для формирования обучающих и тестовых выборок для нейросетевой модели, разработанной в рамках данного исследования.

Таблица 7 – Результаты анализа связи экотоксикологических характеристик со значениями отметок рельефа в месте отбора проб снега

Показатель	всхожесть семян кресс-салата	всхожесть семян кресс-салата, инокулированных <i>Bacillus subtilis</i>	показатель выживаемости дафний	выживаемость дафний в пробах, инокулированных <i>Bacillus subtilis</i>
Коэффициент корреляции	0,75	-0,73	-0,81	-0,83
Коэффициент детерминации	0,81	0,76	0,79	0,81

В рамках исследований была разработана и предложена нейросетевая модель, описывающая уровень загрязнения воздуха в любой точке города с учетом ее локальных орографических характеристик. В качестве входных данных в нейросетевой модели использованы отметка рельефа в месте отбора проб, показатели токсичности проб, полученных с использованием кресс-салата и дафний магна. В качестве выходного значения принят показатель индекса загрязнения атмосферного воздуха в месте отбора пробы снега.

Также были апробированы следующие различные типы нейронных сетей и различные алгоритмы обучения. Наилучшую адекватность нейросетевой модели достигается при использовании нейронной сети Элмана с алгоритмом обучения на базе градиентного спуска с учетом моментов и с адаптивным обучением (таблица 8).

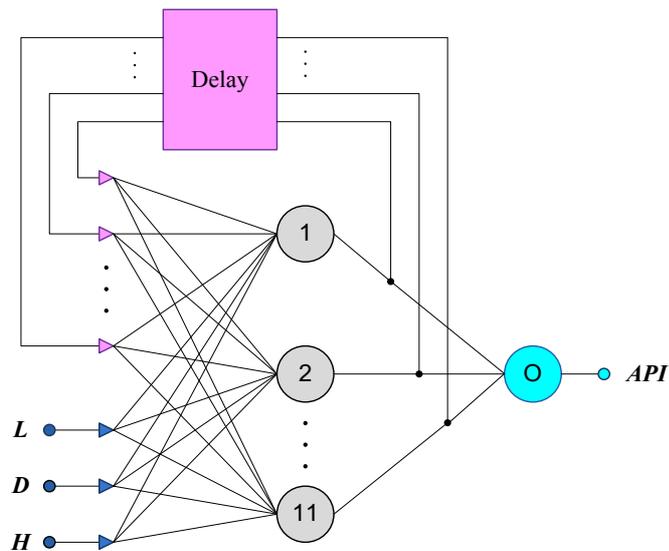
Выполнены исследования по определению оптимального количества нейронов в скрытом слое сети Элмана, однако, вариация количества нейронов в скрытом слое не привела к существенному изменению качества нейросетевой модели. Соответственно, итоговый вариант топологии разработанной нейронной сети представлен на рисунке 5.

Для возможности использования разработанной нейросетевой модели в практических расчетах уровня индекса загрязнения воздуха автором была разработана программа в математической среде MatLab со встроенным пакетом Neural Networks Toolbox, интерфейс которой представлен на рисунке 6.

Таблица 8 – Результаты обучения нейросети различными алгоритмами

Виды алгоритмов	Адекватность полученной модели
Метод градиентного спуска	66,1
Метод градиентного спуска с адаптивным обучением	76,2
Метод градиентного спуска с учетом моментов	21,3
Метод градиентного спуска с учетом моментов и с адаптивным обучением	86,7
Регуляризация Bayesian	33,6

Математическим «ядром» программы является экспортированная из MatLab обученная нейронная сеть Элмана, которая и используется как ключевой блок обработки входных значений и расчета результата.



L – отметка рельефа в любой интересующей пользователя точке г. Стерлитамак; D – показатель токсичности проб, полученный с использованием кресс-салата; H – показатель токсичности проб, полученный с использованием дафний магна; API (air pollution index) – показатель индекса загрязнения атмосферного воздуха; Delay – блок задержки на один временной интервал, используемый в контуре обратной связи в нейронной сети Элмана

Рисунок 5 – Топология нейронной сети Элмана, описывающей уровень загрязнения воздуха в любой точке города с учетом её локальных орографических особенностей

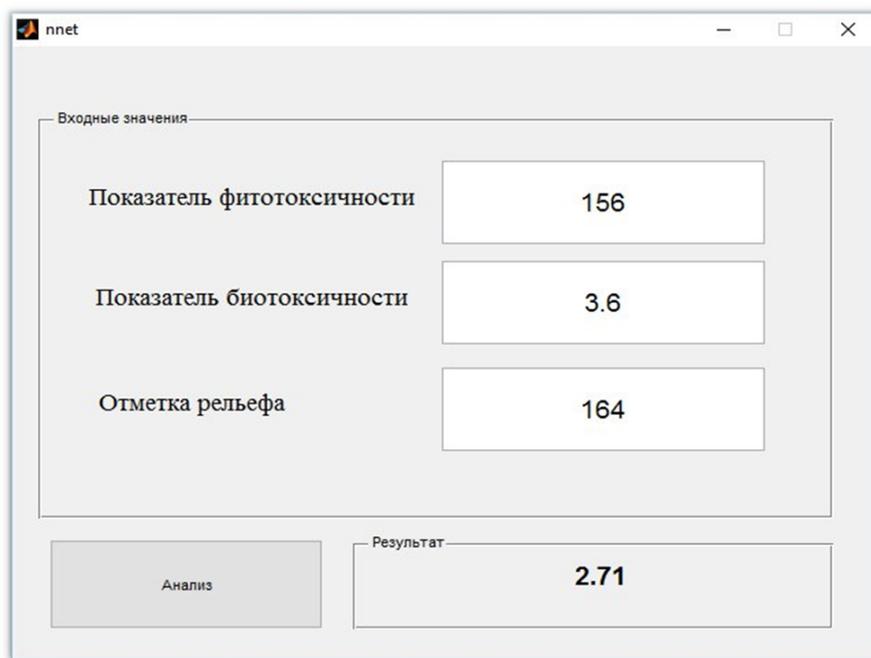


Рисунок 6 – Окно программы для расчета индекса загрязнения атмосферного воздуха на основе нейронной сети Элмана

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1 Проведен анализ данных мониторинга атмосферного воздуха селитебных территорий г. Стерлитамак за 2001 – 2015 гг. Установлена структура временных рядов поллютантов, на основе которой все контролируемые в атмосфере ингредиенты поделены на 3 группы: к первой группе относятся вещества, в годовом цикле которых обнаружена полугодовая цикличность (бензапирен, оксид углерода, оксид серы); у веществ второй группы установлено наличие повышающего тренда (бензол, оксиды азота, толуол, фенол, формальдегид, этилбензол, сероводород). У веществ третьей группы имеется существенный вклад случайной составляющей (аммиак, трихлорметан, гидрохлорид, четыреххлористый углерод, пыль). Указанные свойства позволяют описывать временную динамику содержания поллютантов в воздухе г. Стерлитамак, что важно при выборе модели прогнозирования загрязнения воздуха.

2 Установлено воздействие на уровень загрязнения воздушного бассейна г. Стерлитамак содержания промышленных выбросов и выбросов автотранспорта. Выявлена зависимость уровня загрязнения атмосферного воздуха от отметок рельефа на территории города. Также выявлен и оценен существенный вклад

инерционного фактора влияния метеоусловий во временном ряду содержания в атмосферном воздухе г. Стерлитамака пыли, формальдегида, оксида углерода, диоксида азота и фенола, составляющий от 66 до 94 %.

3 Установлено повсеместное превышение показателей фоновых значений уровня загрязнения воздуха по токсичности проб снежного покрова. Произведена оценка зависимости загрязнения снежного покрова от интенсивности движения транспортных средств на автодорогах (коэффициент корреляции составляет 73 – 90 %), от показателя *ИЗА* (индекса загрязнения атмосферного воздуха) на постах контроля загрязнения атмосферного воздуха (до 97 %), от орографических характеристик местности (75 – 81 %).

4 Разработаны и предложены нейросетевые модели по определению прогнозного уровня загрязнения атмосферного воздуха специфическими загрязняющими веществами в последующие дни на базе индивидуальной нейронной сети с индивидуальным алгоритмом обучения, при которых достигается наилучшая адекватность нейросетевой модели. Лучшие результаты показали модели для оксида азота, аммиака и винилхлорида. Точность краткосрочных прогнозов загрязнения воздуха для этих веществ в выбранных нейросетевых моделях составляет 64 – 74 %.

5 На базе полученных данных о пространственном распределении загрязнения в воздушном бассейне на территории г. Стерлитамак разработана модель, позволяющая описать уровень загрязнения воздуха в любом районе г. Стерлитамак с учетом её орографических особенностей на базе нейронной сети Элмана, адекватность которой составляет 86 %.

6 Разработаны программные реализации предложенных в работе нейросетевых моделей в качестве технических решений для их практического использования в системе поддержки принятия оперативных природоохранных мероприятий по снижению выбросов предприятий химической и нефтехимической промышленности в атмосферный воздух.

Основные результаты работы опубликованы в следующих научных трудах:

Ведущие рецензируемые научные журналы

1 Панченко, А.А. Анализ выбросов в воздушную среду в условиях городских территорий на примере республики Башкортостан и Самарской области / Асфандиярова Л.Р., Даминев Р.Р.,

Васильев А.В., Панченко А.А., Юнусова Г.В. // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. – 2016. – Т. 18. – № 5(3). – С. 512-519.

2 Панченко, А.А. Влияние антропогенных факторов на состояние воздушного бассейна г. Стерлитамака республики Башкортостан / Бикбулатов И.Х., Хайбуллин А.Ф., Асфандиярова Л.Р., Панченко А.А. // Экология и промышленность России. – 2012. – № 4. – С. 54-55.

Статьи в зарубежных научных изданиях, включенных в международные реферативные базы данных и системы цитирования Scopus и Web of Science

1 A. A. Panchenko. Using neural networks for prediction of air pollution index in industrial city / P.A. Rahman, A.A. Panchenko, A.M. Safarov // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. – 2017. – Vol. 87. – P. 042016.

Другие статьи и материалы конференций

1 Панченко, А.А. Разработка метода оценки загрязнения атмосферного воздуха на базе нейронной сети Элмана для промышленного города Стерлитамак / Панченко А.А., Рахман П.А., Сафаров А.М., Асфандиярова Л.Р., Сафаров М.Р. // Нефтегазовое дело. – 2017. – Т. 15. – № 2. – С. 203-208.

2 Панченко, А.А. Разработка нейросетевой модели краткосрочного прогноза загрязнения атмосферного воздуха города Стерлитамак Республики Башкортостан / Сафаров А.М., Рахман П.А., Панченко А.А., Маннанов А.Х. // Нефтегазовое дело. – 2016. – Т. 14. – № 1. – С. 206-212.

3 Панченко, А.А. Региональная проблема снижения выбросов промышленных предприятий в период неблагоприятных метеорологических условий / Бикбулатов И.Х., Асфандиярова Л.Р., Панченко А.А., Ямлиханова Е.А. // Безопасность жизнедеятельности. – 2013. – № 12. – С. 38-40.

4 Панченко, А.А. Оценка негативного воздействия на окружающую среду антропогенных факторов с использованием мониторинга снежного покрова на примере г. Стерлитамак республики Башкортостан / Асфандиярова Л.Р., Панченко А.А., Галимова Г.В., Ямлиханова Е.А., Измestьева М.И., Забиров Т.З. // Нефтегазовое дело. – 2012. – Т. 10. – № 2. – С. 143-147.

5 Панченко, А.А. Анализ и прогнозирование уровня загрязнения воздушного бассейна г. Стерлитамак республики Башкортостан / Панченко А.А., Бикбулатов И.Х., Асфандиярова Л.Р. // Нефтегазовое дело. – 2012. – Т. 10. – № 2. – С. 140-142.

6 Панченко, А.А. Распределение загрязняющих веществ по территории города Стерлитамака / Галимова Г.В., Панченко А.А., Асфандиярова Л.Р., Бикбулатов И.Х. // Материалы международной научно-технической конференции «Радиоэкология. Новые технологии обеспечения экологической безопасности». – Уфа: УГНТУ, 2012. – С. 157-160.

7 Панченко, А.А. Оценка загрязнённости территории промышленного города методом корреляционно-регрессионного анализа / Асфандиярова Л.Р., Панченко А.А., Юнусова Г.В.,

Ямлиханова Е.А., Забиров Т.З., Измestьева М.И. // Материалы Всероссийской научно-технической конференции «Инновационные технологии в области химии и биотехнологии». – Уфа: УГНТУ, 2012. – С. 287-288.

8 Панченко, А.А. Оценка состояния атмосферного воздуха с использованием мониторинга снежного покрова / Асфандиярова Л.Р., Юнусова Г.В., Панченко А.А. // Материалы Всероссийской научно-практической конференции с международным участием «Малоотходные, ресурсосберегающие химические технологии и экологическая безопасность». – Уфа: УГНТУ, 2013. – С. 270-271.

9 Панченко, А.А. Определение зоны воздействия выбросов автомобильных дорог на основе мониторинга загрязнения снежного покрова / Панченко А.А., Маннанов А.Х., Фаткуллина Э.Ф., Арефьева А.А. // Сборник трудов Всероссийской научно-технической конференции «Фундаментальные и прикладные исследования в технических науках в условиях перехода на импортозамещение». – В 2-х томах. – Т. 1. – Уфа: УГНТУ, 2015. – С. 355-356.

10 Панченко, А.А. Оценка воздействия выбросов автотранспорта на воздушную среду города с помощью анализа снежного покрова / Арефьева А.А., Панченко А.А., Курамшина З.М. // Материалы 20-й Международной Пущинской конференции молодых ученых «Биология – наука XXI века». – Пущино, 2016. – С. 372.