

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА МОДЕЛЕЙ ГАУССА И MPP-2017 С ПОМОЩЬЮ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА

QUALITY ASSESSMENT OF GAUSS AND MRR-2017 MODELS BY APPLYING THE METHOD OF REGRESSION ANALYSIS

**K. Zavitaev
O. Yagolnitzer**

Summary. The article is devoted to the topic of regression analysis of Gauss and MRR-2017 models, where the quality assessment of two models was carried out for the predetermined parameters of the technological process, as well as the dependence between the distance from the pollution source and the concentration of nitrogen dioxide was determined. Regression analysis and quality assessment of Gaussian and MRR-2017 models were carried out for two closely located sources of pollution, which are the basis for the diversion of harmful substances formed because of fuel combustion in the boilers of the boiler plant. The aim of the work is to determine the strength of the closeness of the relationship between the distance from the pollution source and the concentration of the studied substance, as well as to assess the quality of the most popular models of dispersion of harmful substances as a means of automating the distribution of the content of harmful substances in the surface layer of the atmosphere. Special attention is paid to the comparative analysis of Gaussian and MRR-2017 models using the criteria of coefficient of determination and sum of squares of residuals, the value of which determines the quality of the two studied models for forecasting. Using regression analysis, it is possible to determine not only how good a particular model is and can be used by environmental protection agencies, but also to create prerequisites for training and improving new models in environmental protection activities.

Keywords: regression analysis, coefficient of determination, sum of squares of residuals, Gaussian model, MRR-2017, model quality, automation tools.

Завитаев Кирилл Витальевич

Аспирант, ФГАОУ ВО «Московский государственный
технологический университет «СТАНКИН»

k.zavitaev@stankin.ru

Ягольницер Ольга Владимировна

кандидат технических наук,

ФГАОУ ВО «Московский государственный
технологический университет «СТАНКИН»

o.yagolnicer@stankin.ru

Аннотация. Статья посвящена теме регрессионного анализа моделей Гаусса и MPP-2017, где проводилась оценка качества двух моделей при заранее известных параметрах технологического процесса, а также определялась зависимость между расстоянием от источника загрязнения и концентрацией диоксида азота. Регрессионный анализ и оценка качества моделей Гаусса и MPP-2017 проводились для двух близко расположенных источников загрязнения, являющимися основой для отвода образуемых вредных веществ в результате сжигания топлива в котлах котельной тепловой станции. Целью работы является определение силы тесноты связи расстояния от источника загрязнения и концентрации исследуемого вещества, а также оценка качества наиболее популярных моделей рассеивания вредных веществ в приземном слое атмосферы. Особое внимание уделяется сравнительную анализу моделей Гаусса и MPP-2017 с помощью критериев коэффициента детерминации и суммы квадратов остатков, значение которых и определяет качество двух исследуемых моделей для прогнозирования. Используя регрессионный анализ можно определить не только то, насколько та или иная модель хороша и может использоваться агентствами по защите окружающей среды, но и создавать предпосылки для обучения и улучшения новых моделей в природоохранной деятельности.

Ключевые слова: регрессионный анализ, коэффициент детерминации, сумма квадратов остатков, модель Гаусса, MPP-2017, качество моделей, средства автоматизации.

Введение

В настоящее время выбросы промышленных предприятий оказывают существенное влияние на здоровье людей и состояние окружающей среды.

Для решения этой проблемы предприятия прибегают не только к соблюдению экологического законодательства по нормированию массовых и валовых выбросов загрязняющих веществ, но и применяют различные методы автоматизации, с помощью которых можно решать как природоохранные задачи, так и на основе этого оптимизировать параметры технологического процесса.

Если рассмотреть котельные тепловые станции, как источник загрязнения атмосферного воздуха, то применение методов автоматизации таких как математическое моделирование или машинное обучение поможет не только распределять тепловую нагрузку котлов, но и подбирать оптимальные параметры процесса сжигания топлива, а также используемый вид сырья.

В этой статье затронем прежде всего тему математического моделирования, проведя анализ наиболее популярных расчетных моделей таких как, модель Гаусса и MPP-2017. Дополнительно оценим качество используемых

емых моделей, зная параметры технологического процесса, используя регрессионный анализ данных, а также определим силу тесноты связи между расстоянием от источника загрязнения и концентрацией загрязняющих веществ.

Научной новизной данной работы является нахождение зависимостей между расстоянием от источника загрязнений и содержанием диоксида в приземном слое атмосферного воздуха. При нахождении зависимости будут заранее известны, как параметры источника загрязнения, так и технические характеристики используемого оборудования.

Практической значимостью данной работы является то, что обе модели могут быть применены, однако их выбор зависит от того, насколько политика государства и агентства по защите окружающей среды жестко прилегают к установленным нормативам.

Целью работы является оценка качества моделей Гаусса и MPP-2017 с помощью регрессионного анализа и определение зависимости между расстоянием от источника загрязнения и концентрацией диоксида азота.

Материалы и методы

Регрессионный анализ и оценка качества моделей Гаусса и MPP-2017 проводились для двух близко расположенных источников загрязнения со следующими параметрами:

- Мощность выброса: $q_1=2,72$ г/с, $q_2=2,72$ г/с.
- Высота источника: $h_1=30$ м, $h_2=30$ м.
- Количество дымовых труб — 2.
- Диаметр устья каждого стационарного источника — $D=1,84$ м.
- Температура ГВС — $T=145$ °С.
- Объем дымовых отходящих газов — $V=20,69$ м³/с.

Исследуемое вещество — диоксид азота. Количество используемых котлов — 6 шт. (3 котла отводят образующую газовую смесь через одну трубу, 3 других котла через другую).

Метеорологические параметры района и топографические факторы местности, где размещены источники загрязнения:

- Средняя скорость ветра: $U=6$ м/с.
- Наиболее частые погодные явления: облачность и ветреная погода.
- Расчетная температура наиболее холодного месяца, $-10,2$ °С.
- Расчетная температура наиболее теплого месяца, $26,1$ °С.
- Коэффициент А, зависящий от температурной стратификации атмосферы — 140.
- Коэффициент оседания диоксида азота: $F=1$.

Расчетные точки для определения зависимости между расстоянием от источника загрязнения и концентрации диоксида азота, а также для последующей оценки качества моделей Гаусса и MPP-2017:

- С (48,8; 101,83; 2).
- С (100,87; 9,07; 2).
- С (418,53; -543,13; 2).
- С (513,59; 101,64; 2).
- С (841,23; 33,84; 2).

Оценка качества моделей Гаусса и MPPA-2017 и определение силы тесноты связи между расстоянием от источника загрязнения и концентрации диоксида азота проводится с помощью регрессионного анализа, где в качестве критериев определялись значения коэффициента детерминации и сумма квадратов остатков.

Литературный обзор

В статье Мамурова Б.Ж. и Абдуллаева Ж.Ж. описан метод применения регрессионного анализа, как один из эффективных способов нахождения зависимости между переменными, что позволяет оценить насколько итоговый результат может быть приближен к реальным значениям и хорошо зависит от множества факторов [1].

Например, Ефремов Н.Ю. занимаясь исследованием влияния технологических параметров на показатели качества наполненных полимеров применяет метод регрессионного анализа для моделирования зависимости показателей качества от параметров технологического процесса [2].

Однако в инженерной экологии еще не было случая, когда кто-то из авторов устанавливал зависимость между расстоянием от источника загрязнения и концентрацией вредного вещества, учитывая множество факторов, например, геометрические размеры источника загрязнения, метеорологические условия, параметры выброса и топографические факторы местности. Применяя регрессионный анализ, можно находить не только зависимость между переменными, но и проводить оценку качества как ранее использованных моделей, так и новых.

Результаты

Рассмотрим статистическую модель Гаусса.

Пространственное распределение загрязняющего вещества вдоль оси распространения факела, выбрасываемого от стационарного источника загрязнения, можно представить в виде одномерного уравнения Гаусса:

$$(x, y, z) = \frac{q}{2\pi\delta_y\delta_z u} \exp\left(\frac{-y^2}{\delta_y^2}\right) \left[\exp\left(\frac{-(z-h)^2}{\delta_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+h)^2}{\delta_z^2}\right) \right],$$

где q — мощность выброса, г/с;
 h — высота источника, м;
 u — средняя скорость ветра, м/с;
 ось y — поперечно-горизонтальное направление;
 ось z — направлена вертикально вверх;
 δ_y и δ_z — горизонтальная и вертикальная функция
 рассеяния источника [3–4].

Помимо того, что данная модель подчиняется закону нормального распределения и отлично может быть применима в математике, особенно для распределения степени разброса случайной величины, в данной работе в роле случайной величины может выступать как раз значение концентрации загрязняющего вещества. В нашем случае это диоксид азота.

При рассмотрении стационарной модели Гаусса применяются допущения:

1. Рассеивание струи в двух взаимно расположенных плоскостях (горизонтальной и вертикальной) описывается гауссовым распределением со стандартными отклонениями распределения концентраций δ_y и δ_z по осям y и z соответственно.
2. Действующая на поведение газовой струи в воздухе и на турбулентное перемешивание частиц скорость ветра u считается постоянной во всем слое распространения струи, направление ветра не меняется. При расчете максимальной приземной концентрации вредных примесей учитывается средняя скорость ветра, характерная для района, где расположен источник загрязнения.
3. Мощность выброса постоянна.
4. Имеет место отражение струи от поверхности земли, т.е. нет гравитационного осаждения взвешенных частиц или взаимодействия струи с подстилающей поверхностью.

Вертикальная и горизонтальная функция рассеивания загрязняющих веществ зависит от категории устойчивости атмосферы, причем вертикальная стратификация атмосферного воздуха определяется от средней скорости ветра, характерной для конкретного района, степени инсоляции днем и облачностью ночью [5].

Формулы для вертикальной и горизонтальной функций рассеивания вредных веществ для δ_y и δ_z , рекомендованные Бриггсом для расстояний от 100 до 10000 м в условиях жилой застройки (городской) и открытой местности, приведены в таблице 1 [6].

Рекомендуемые классы устойчивости атмосферы по Паскуиллу в зависимости от метеорологических условий приведены в таблице 2.

Рассмотрим модель MPP-2017.

Таблица 1.

Формулы для вертикальной и горизонтальной функций рассеивания вредных веществ

Класс устойчивости атмосферы	Категория устойчивости	$\delta_y, \text{ м}$	$\delta_z, \text{ м}$
A	Сильно-неустойчивое (1)	$0,22x(1+0,0001x)^{-1/2}$	$0,2x$
B	Неустойчивое (2)	$0,16x(1+0,0001x)^{-1/2}$	$0,12x$
C	Слабо неустойчивое (3)	$0,11x(1+0,0001x)^{-1/2}$	$0,08x(1+0,0002x)^{-1/2}$
D	Равновесное (4)	$0,08x(1+0,0001x)^{-1/2}$	$0,06x(1+0,0015x)^{-1/2}$
E	Слабоустойчивое (5)	$0,06x(1+0,0001x)^{-1/2}$	$0,03x(1+0,0003x)^{-1}$
F	Устойчивое (6)	$0,04x(1+0,0001x)^{-1/2}$	$0,016x(1+0,0003x)^{-1}$
Городская местность			
A-B	Неустойчивое (1–2)	$0,32x(1+0,0004x)^{-1/2}$	$0,24x(1+0,001x)$
C	Слабо неустойчивое (3)	$0,22x(1+0,0004x)^{-1/2}$	$0,2x$
D	Равновесное (4)	$0,16x(1+0,0004x)^{-1/2}$	$0,14x(1+0,0003x)^{-1/2}$
E-F	Устойчивое (5–6)	$0,11x(1+0,0004x)^{-1/2}$	$0,08x(1+0,0015x)^{-1/2}$

Таблица 2.

Классы устойчивости атмосферы Паскуилла [7–8]

Скорость ветра на высоте 10 м, м/с	Степень инсоляции днем			Облачность ночью, баллы	
	сильная	умеренная	слабая	10 (общая) или >5 (нижняя)	<4 (нижняя)
<2	A	A-B	B	–	–
2–3	A-B	B	C	E	F
3–5	B	B-C	D	D	E
5–6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Данная модель удобна тем, что анализ загрязнения атмосферного воздуха учитывается при неблагоприятных метеорологических условий и зависит от множества факторов: характеристики источника выброса, определяющие эффективную высоту ГВС, ширину газовой струи и температуру отводимой смеси; топографических факторов местности таких как рельеф местности и характер жилой застройки; параметров технологического процесса, влияющих на количество вредных веществ, выбрасываемых в окружающую среду, а также от вида используемого топлива (процентное содержание примесей и низшая теплота сгорания).

Значение максимальной приземной концентрации, зависящая от вышесказанных факторов рассеивания вредных веществ имеет вид:

$$C_m = \frac{A \times M \times F \times t \times n \times \mu}{H^2 \times \sqrt[3]{V_1 \times \Delta T}}$$

где A — коэффициент вертикальной стратификации атмосферы при неблагоприятных метеоусловиях;

M — масса загрязняющего вещества, выбрасываемого в единицу времени, г/с;

F — безразмерный коэффициент, учитывающий скорость оседания примесей;

t и n — безразмерные коэффициенты, учитывающие условия выброса из устья источника выброса;

μ — безразмерный коэффициент, учитывающий влияние рельефа местности;

H — высота источника выброса, м;

V_1 — объем или расход ГВС, м³/с;

ΔT — разность между температурой выбрасываемой ГВС T_r и температурой окружающего воздуха T_b , °C [9–10].

Итоговые значения концентраций диоксида азота, определенных с помощью моделей Гаусса и MPP-2017 приведены в таблице 3.

Таблица 3.

Значения концентраций диоксида азота в приземном слое атмосферы

Вещество: 0301 Азота диоксид (двуокись азота, пероксид азота)		
Расстояние X, м	Концентр, мг/м ³ , MPP-2017	Концентр, мг/м ³ , модель Гаусса
48,8	0,016	0,004
100,87	0,02	0,07
418,53	0,048	0,082
513,59	0,054	0,066
841,23	0,044	0,01

Построим графики зависимостей концентрации диоксида азота от расстояния источника загрязнения, содержание которого были определены с помощью модели Гаусса и MPP-2017.

Если посмотреть на то, как меняются графики, то отчетливо можно заметить, насколько большая разница между значениями концентраций диоксида азота в каждой расчетной точке. Теперь осталось объяснить, какая



Рис. 1. Графики распределения концентраций диоксида азота при использовании моделей Гаусса и MPP-2017

из двух моделей лучше объяснила исследуемый ряд или набор данных. Для этого проведем регрессионный анализ моделей.

Чтобы понять, насколько та или иная модель хороша, чтобы ее в дальнейшем использовать как для прогнозирования, так и для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха, нужно опираться на два критерия: коэффициент детерминации и сумма квадратов остатков.

Коэффициент детерминации принимает значения от 0 до 1. Если рассматриваемый параметр приближается к 1, то данную оценочную модель мы можем считать хорошей.

Если говорить про критерий суммы квадратов остатков, то при проведении сравнительного анализа оценочных моделей лучше будет та, у которой значение этого критерия будет меньше.

Регрессионный анализ двух оценочных моделей приведена в таблице 4.

Таблица 4.

Регрессионный анализ

Регрессионная статистика		
	Модель Гаусса	MPP-2017
R-квадрат	0,032	0,62
Нормированный R-квадрат	0,031	0,5
Стандартная ошибка	0,041	0,012
Число исследуемых параметров	5	5

Расчет суммы квадратов остатков:

Как отмечалось ранее, в качестве зависимых и независимых переменных будут приниматься расчетные точки, которые и служат расстоянием от источника загрязнения, и концентрация диоксида азота в приземном слое атмосферы. Набор данных приведен в таблице 5.

Таблица 5.

Набор данных по модели Гаусса

№ п/п	X	Y
1	48,8	0,004
2	100,87	0,07
3	418,53	0,082
4	513,59	0,066
5	841,23	0,01

Расчетные коэффициенты регрессии приведены в таблице 6.

Таблица 6.

Расчетные коэффициенты регрессии

№ п/п	X	Y	X _i ²	Y _i ²	X _i * Y _i
1	48,8	0,004	2381,44	1,6 * 10 ⁻⁵	0,195
2	100,87	0,07	10174,76	0,0049	7,06
3	418,53	0,082	175167,36	0,0067	34,32
4	513,59	0,066	263774,69	0,0044	33,896
5	841,23	0,01	707667,91	0,0001	8,41
Сумма	1923,02	0,232	1159166,16	0,0161	83,885

Сумма квадратов остатков определяются по формулам:

$$SS_{XX} = \sum_{i=1}^n X_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n X_i)^2 = 1159166,16 - 0,2 * (1923,02)^2 = 419564,97$$

$$SS_{YY} = \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n Y_i)^2 = 0,0161 - 0,2 * (0,232)^2 = 0,0053$$

$$SS_{XY} = \sum_{i=1}^n X_i Y_i - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n X_i) (\sum_{i=1}^n Y_i) = 83,88 - 0,2 * (1923,02) * (0,232) = -5,3433$$

Коэффициент наклона:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{SS_{XY}}{SS_{XX}} = \frac{-5,3433}{419564,97} = -0,000013$$

Общая сумма квадратов остатков принимает вид:

$$SS_{tot} = SS_{YY} = 0,0053$$

Сумма регрессии квадратов:

$$SS_R = \hat{\beta}_1 * SS_{XY} = -0,000013 * (-5,3433) = 0,0001$$

Общая сумма квадратов определяется как сумма регрессии квадратов и суммы квадратичных ошибок. Отсюда следует, что сумма квадратов остатков принимает вид и имеет значение:

$$SS_E = SS_{tot} - SS_R = 0,0053 - 0,0001 = 0,0052$$

Проведем аналогичный расчет для модели MPP-2017, после чего оценим, какая из двух ранее описанных моделей лучше и может использоваться для прогнозирования и анализа уровня загрязнения атмосферного воздуха. Набор зависимых и независимых переменных по модели MPP-2017 приведены в таблице 7.

Таблица 7.

Набор данных по модели MPP-2017

№ п/п	X	Y
1	48,8	0,016
2	100,87	0,02
3	418,53	0,048
4	513,59	0,054
5	841,23	0,044

Расчетные коэффициенты регрессии п модели MPP-2017 приведены в таблице 8.

Таблица 8.

Расчетные коэффициенты регрессии

№ п/п	X	Y	X ²	Y ²	X _i * Y _i
1	48,8	0,016	2381,44	2,56*10 ⁻⁴	0,781
2	100,87	0,02	10174,76	0,0004	2,017
3	418,53	0,048	175167,36	0,0023	20,089
4	513,59	0,054	263774,69	0,0029	27,734
5	841,23	0,044	707667,91	0,0019	37,014
Сумма	1923,02	0,182	1159166,16	0,0078	87,636

Сумма квадратов остатков:

$$SS_{XX} = \sum_{i=1}^n X_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n X_i)^2 = 1159166,16 - 0,2 * (1923,02)^2 = 419564,97$$

$$SS_{YY} = \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n Y_i)^2 = 0,0078 - 0,2 * (0,182)^2 = 0,0012$$

$$SS_{XY} = \sum_{i=1}^n X_i Y_i - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n X_i) (\sum_{i=1}^n Y_i) = 87,636 - 0,2 * (1923,02) * (0,182) = 17,638$$

Коэффициент наклона:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{SS_{XY}}{SS_{XX}} = \frac{17,638}{419564,97} = 0,00004$$

Общая сумма квадратов остатков принимает вид:

$$SS_{tot} = SS_{YY} = 0,0012$$

Сумма квадратов регрессии:

$$SS_R = \hat{\beta}_1 * SS_{XY} = 0,00004 * 17,638 = 0,0007$$

Сумма квадратов остатков для модели MPP-2017:

$$SS_E = SS_{tot} - SS_R = 0,0012 - 0,0007 = 0,0005$$

Обсуждение

Исходя из полученных значений можно сделать следующий вывод: модель MPP-2017 лучше объяснила исследуемый набор данных, а именно зависимость между концентраций загрязняющих веществ и расстоянием от источника загрязнения. Если говорить про оценку качества модели, то MPP-2017 также лучше.

Этому есть ряд объяснений. MPP-2017 содержит много поправочных коэффициентов, влияющих как на распределение загрязняющих веществ, так и на их рассеивание в приземном слое атмосферы, например рельеф местности, герметические размеры источника загрязнения и метеорологические условия.

Однако, не стоит отказываться и от модели Гаусса. Данная модель может быть хороша в случае быстрого прогнозирования изменение концентрации загрязняющих веществ в случае возникновения залповых выбросов или аварийных ситуаций. Например, с помощью модели Гаусса можно быстро оценить содержание техногенных радионуклидов в случае возникновения аварии ядерного реактора.

За счет проведения оценки качества моделей и нахождения зависимостей между переменными создаются предпосылки для использования наиболее популярного средства автоматизации, как машинное обучение.

Проводя регрессионный анализ, можно не только найти новую зависимость, но и проверить насколько хорошо будет обучена та или иная модель.

Заключение

Регрессионный анализ — это отличный метод, с помощью которого можно проводить оценку моделей, используемых для прогнозирования любого интересующего нас параметра. Если говорить про природоохранную деятельность, то применение регрессионного анализа позволяет определить, как зависимость двух или нескольких переменных, так и понять, насколько применение той или иной модели будет хорошо использоваться в практике.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мамуров Б.Ж., Абдуллаев Ж.Ж. Регрессионный анализ как средство изучения зависимости между переменными // *European science* № 2 (58), 2021, с. 7–10.
2. Ефремов Н.Ю. Применение регрессионного анализа для исследования влияния технологических параметров на показатели качества наполненных материалов // *Машиностроение и машиноведение, Известия Самарского научного центра Российской академии наук*, т. 22, № 4, 2020, с. 81–85.
3. Рашевский Николай Михайлович Поддержка принятия решений в процессе мониторинга загрязнения атмосферного воздуха городских территорий: диссертация кандидата технических наук: 05.13.01 Волгоград 2019, с. 144.
4. Copelli S., Barozzi M., Fumagalli A., Derudi M., Application of a Gaussian model to simulate contaminants dispersion in industrial accidents, (2019) *Chemical Engineering Transactions*, 77, pp. 799–804.
5. Рыбников П.А., Осадчая И.С. Математические модели распространения примесей в атмосфере. Теория и практика мировой науки. 2021. №11. С. 57–66.
6. Новицкая А.И., Игумнов Д.А. Моделирование распространения загрязняющих вещества в атмосфере на основании модели Гаусса. *Студенческий вестник*. 2019. № 35–2 (85). С. 61–66.
7. Jonathan D.W. Kahl, Hillary L. Chapman, Atmospheric stability characterization using the Pasquill method: A critical evaluation, *Atmospheric Environment* 187 (2018), pp. 196–209.
8. Прогнозно-аналитические решения по природным, техногенным и биологосоциальным угрозам единой системы информационно-аналитического обеспечения безопасности среды жизнедеятельности и общественного порядка «Безопасный город»: Монография / В.А. Акимов, А.В. Мишурный, О.В. Якимюк, А.В. Бобрешова, Е.О. Иванова, С.В. Колеганов, И.В. Курличенко, С.В. Пигина, Д.В. Степаненко, И.Ю. Щедров / Под ред. А.П. Чуприяна / МЧС России. М.: ФГБУ ВНИИ ГОЧС (ФЦ), 2022. 316 с.
9. Семакина А.В. Картографирование загрязнения атмосферного воздуха городской среды. *Вестник Удмуртского университета. Серия Биология. Науки о Земле*. 2024. Т. 34. № 1. С. 41–53.
10. Крайнов В.А., Копеистова Д.Ю. Анализ подходов к моделированию выбросов в атмосферный воздух. В сборнике: *Молодежь. Наука. Общество* — 2022. 2023. С. 577–584.

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