

Модель оценивания аэрозольных выпадений бенз(а)пирена в окрестностях Новосибирского электродного завода

В.Ф. Рапута¹, С.Е. Олькин², И.К. Резникова^{2*}

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6

²ФГУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора
633159, пос. Кольцово, Новосибирская обл.

Поступила в редакцию 24.01.2009 г.

В рамках кинематической схемы описания процесса распространения в атмосфере тяжелой полидисперсной примеси предложена модель количественной интерпретации данных маршрутных наблюдений полей выпадений в окрестности точечного источника. На ее основе выполнен численный анализ данных экспериментальных исследований загрязнения бенз(а)пиреном снежного покрова, проведенных в конце зимнего сезона 2008 г. в окрестностях Новосибирского электродного завода. Показано, что наибольшее количество бенз(а)пирена выпало в ближней окрестности высотной трубы завода в составе крупных фракций частиц аэрозоля.

Ключевые слова: атмосфера, загрязнения, аэрозоль, источник, моделирование, оптимизация, оценка, реконструкция.

Введение

Закономерности распространения в атмосфере и выпадения на земную поверхность тяжелых примесей представляют значительный интерес для решения многих практических задач и изучения турбулентных свойств атмосферы [1–3]. Движение в атмосфере облака тяжелых частиц определяется в основном двумя факторами: действием силы тяжести на эти частицы в сочетании с силами сопротивления со стороны воздуха и полем ветра. Под влиянием первого из этих факторов происходит опускание частиц, под влиянием второго – перенос облака в горизонтальном направлении.

Следует также отметить, что по мере увеличения скорости осаждения частиц происходит убывание коэффициентов турбулентного обмена. При скоростях оседания порядка 1 м/с вполне пригодна для использования кинематическая схема выпадения частиц на поверхность земли [4–6]. При описании распространения более мелких фракций аэрозольных примесей следует учитывать эффекты турбулентного перемешивания в атмосфере [7–9].

При проведении численного моделирования и интерпретации данных экспериментальных исследований распространения тяжелых примесей требуется также информация о функции распределения спектра размеров частиц, которая, как правило, отсутствует. В этом случае возникает необходимость учета дополнительных априорных сведений о возможных

описаниях функции распределения спектра размеров и постановках соответствующих обратных задач переноса примеси в приземном и пограничном слоях атмосферы [10–12].

1. Экспериментальные исследования

Новосибирский электродный завод (НЭЗ) расположен в равнинной местности в 50 км южнее Новосибирска. Основное производство основано на технологии пиролиза графита, изготовленного из антрацита Горловского разреза, кокса, каменноугольного пека, кубовых остатков нефтехимии. Полиароматические углеводороды (ПАУ) составляют основную часть выбросов завода в атмосферу. Выброс смолистых веществ, включающих бенз(а)пирен (БП) и другие ПАУ, формируется в основном в цехе обжига и в настоящее время осуществляется через одну 180-метровую трубу в связи с проводимой реконструкцией очистного оборудования.

Отбор проб снега в окрестностях НЭЗ проводился в конце февраля 2008 г. по двум радиальным относительно трубы маршрутам, направленным на север и северо-восток. Основной снос примесей в зимнее время происходит по этим направлениям [13]. Схема отбора снежевых проб представлена на рис. 1.

Точки пробоотбора на маршрутах размещались с учетом предварительной информации об источниках выброса ПАУ, условиях местности, системе дорог, размещении застройки и лесных насаждений, состоянии снежного покрова, климатических характеристиках повторяемости и скорости ветра в зимнее время и т.д. Наличие двух маршрутов позволяет

* Владимир Федотович Рапута (raputa@sscc.ru); Сергей Евгеньевич Олькин; Ирина Константиновна Резникова.

повысить контроль точности оценивания полей загрязнения снежного покрова.

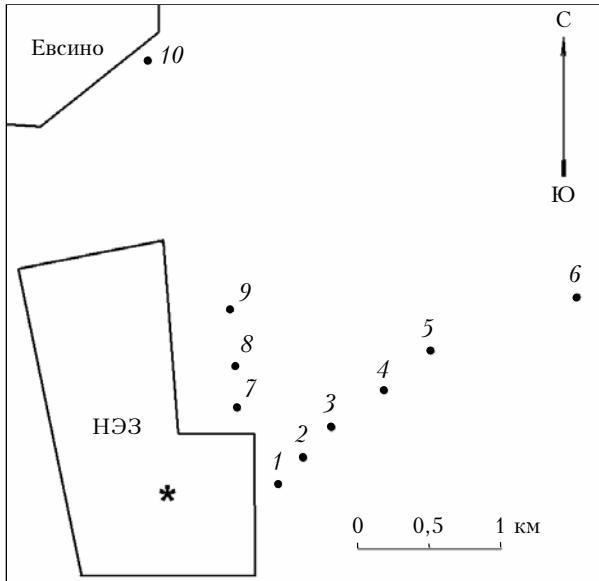


Рис. 1. Схема отбора снеговых проб в районе Новосибирского электродного завода. * — основной источник выброса бенз(а)пирена

В таблице приведены результаты химико-аналитических исследований снеговых проб.

Загрязнение снега бенз(а)пиреном в окрестностях высотной трубы обжигового цеха НЭЗ

Номер точки	Расстояние от трубы, км	Концентрация, мкг/л
<i>Северо-восточное направление</i>		
1	0,8	10,43
2	1,05	5,06
3	1,35	3,12
4	1,8	0,68
5	2,24	0,49
6	3,21	0,2
<i>Северное направление</i>		
7	0,78	29,01
8	1,08	14,8
9	1,4	7,05
10	3,16	0,64

Анализ данных, представленных в таблице, показывает, что концентрация БП в снеге, несмотря на значительную высоту трубы, с удалением от источника быстро уменьшается. По характеру изменения концентрации БП с удалением от завода видно, что в данном случае вклад доли мелких частиц, содержащих БП, в ближней зоне выпадений (до 3 км) относительно невелик. Это утверждение вытекает из анализа соотношения [7]:

$$s(x) = s_{\max} \left(\frac{x_{\max}}{x} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{3}{2} \left(1 - \frac{x_{\max}}{x} \right) \right],$$

связывающего приземную концентрацию легкой примеси $s(x)$ по оси факела с ее максимальной концен-

трацией s_{\max} , достигаемой в точке x_{\max} . Для определенных метеорологических условий x_{\max} может достигать 6–8 км. Учитывая унимодальность функции $s(x)$ и используя значения концентраций БП в максимально удаленных от трубы точках измерений (точки № 6, 10), получим, что s_{\max} даже в северном направлении не превышает 1,5 мкг/л. По мере приближения от x_{\max} к источнику функция $s(x)$ довольно быстро убывает.

Таким образом, основные выпадения БП в зоне до 3 км от трубы связаны с крупными композитными частицами и обусловлены спецификой протекающих технологических процессов. К северу, в непосредственной близости от завода в соответствии с направлениями преобладающих в течение зимы ветров, сформировалась область очень высоких концентраций.

2. Постановка обратной задачи переноса полидисперсной примеси

Результаты проведенных экспедиционных и химико-аналитических исследований позволяют предположить, что выпадение БП в исследуемой зоне происходит в составе аэрозольных фракций, обладающих весьма значительными скоростями оседания в атмосфере. В данном случае для описания процесса выпадения БП на снеговой покров ограничимся кинематическим приближением, которое можно выразить следующим соотношением:

$$H/w = x/U. \quad (1)$$

Здесь H — высота источника; w — скорость оседания определенной фракции частиц; x — расстояние от трубы, на котором происходит выпадение рассматриваемой фракции на подстилающую поверхность; U — средняя скорость ветра в слое оседания.

Распределение аэрозольной примеси в источнике по скоростям оседания w удобно задавать в виде следующей двухпараметрической функции [10, 14]:

$$N(w) = \frac{a^{n+1}}{\Gamma(n+1)} w^n e^{-aw}; \quad n \geq -1; \quad a = n/w_m, \quad (2)$$

где параметр w_m характеризует скорость преобладающей по количеству частиц фракции примеси; n — степень однородности распределения частиц примеси по скоростям w ; $\Gamma(n)$ — гамма-функция.

С учетом (1), (2) количество полидисперсной примеси, выпадающей на расстоянии x для заданного направления и скорости ветра за время T , можно оценить с помощью соотношения

$$P(x) = QTN(UH/x), \quad (3)$$

где Q — производительность источника. Тогда концентрация примеси в снеге описывается следующей функциональной зависимостью:

$$q(x, \theta) = \theta_1 x^{\theta_2} \exp(-\theta_3/x), \quad (4)$$

где

$$\theta_1 = \frac{c Q T a^{n+1} (U H)^n}{\Gamma(n+1)}, \quad \theta_2 = -n, \quad \theta_3 = a U H; \quad (5)$$

c – коэффициент разбавления примеси в снеге.

Оценка неизвестного вектора параметров θ проводится с использованием метода наименьших квадратов [15]. Минимизируется следующий функционал:

$$J(\theta) = \sum_{j=1}^M \sigma_j^{-2} [r_j - q(x_j, \theta)]^2 \rightarrow \min_{\theta \in \Omega}. \quad (6)$$

Здесь r_j – измеренный уровень загрязнения в точке x_j ; σ_j – дисперсия ошибки измерения; Ω – область допустимых значений вектора θ .

Замечание 1. Несколько более громоздкое соотношение, обобщающее (4), может быть получено и с учетом действия турбулентного обмена в горизонтальных направлениях на основе аналитического решения полуземпирического уравнения турбулентной диффузии примеси, которое с использованием (2) можно представить в виде [11]:

$$s(x) = R(\kappa^2 + v)^{-\frac{n+2,5}{2}} \exp\left(2\kappa - 2\sqrt{\kappa^2 + v}\right), \quad (7)$$

где

$$R = \frac{Q T v^{n+1} \left(\frac{U}{4K_x} \right)^2 \sqrt{K_y}}{\sqrt{\pi} \Gamma(n+1)}; \quad \kappa = \frac{xU}{4K_x}; \quad v = \frac{nHU}{4w_m K_x};$$

K_x, K_y – коэффициенты турбулентного обмена в продольном и поперечном ветру направлениях. В частности, при достаточно больших x [16]:

$$\sqrt{\kappa^2 + v} \approx \kappa + v/2\kappa. \quad (8)$$

Тогда с учетом (7), (8) получаем следующее соотношение:

$$\begin{aligned} s(x) &\approx R \kappa^{-(n+2,5)} \exp\left(-\frac{v}{\kappa}\right) = \\ &= R \left(\frac{U}{4K_x} \right)^{-(n+2,5)} x^{-(n+2,5)} \exp\left(-\frac{nH}{w_m x}\right), \end{aligned} \quad (9)$$

которое с введением дополнительных агрегированных обозначений совпадает с (4).

Замечание 2. Решение задачи минимизации функционала (6) с учетом соотношений (2), (5), по сути, дает реальную возможность оценить характеристики дисперсного состава примеси. Для этого при известной высоте источника необходимо определить среднюю скорость ветра U в слое оседания, используя данные метеонаблюдений рассматриваемого зимнего сезона либо зимние климатические характеристики скорости ветра данной местности. Оценки параметров подгонки θ_1, θ_2 и θ_3 в зависимости (4), полученные для одного радиально выбранного относительно источника маршрута наблюдения, могут быть использованы и для других маршрутов, что позволяет существенно снизить для них

количество опорных точек наблюдений. В этом случае нет необходимости проводить оценку параметра θ_2 . Для направлений переноса примеси, имеющих близкие климатические характеристики по скорости ветра, можно использовать оценку параметра θ_3 , полученную для одного из направлений.

3. Численное моделирование

Для оценки трех параметров подгонки (4) необходимо использовать наблюдения не менее чем в трех точках по маршруту отбора снеговых проб. Их выбор проводился с использованием методов и алгоритмов построения локально оптимальных планов наблюдения [17]. На рис. 2, *a* приведены результаты восстановления поля концентрации БП по трем опорным точкам измерений в северо-восточном направлении от источника.

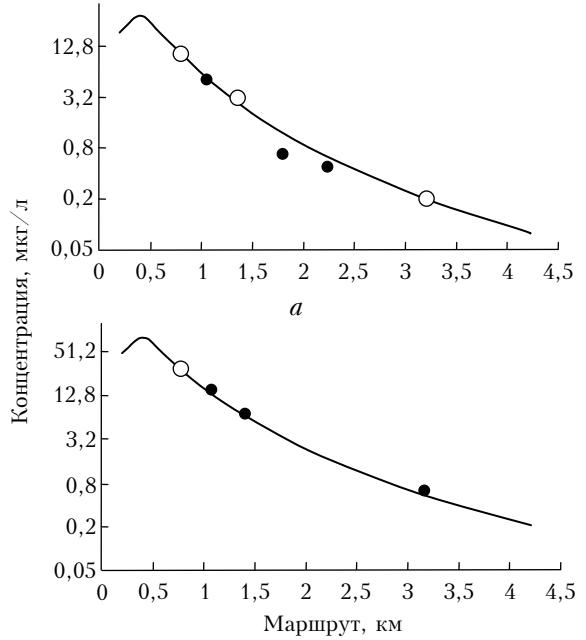


Рис. 2. Восстановленные по данным наблюдений поля концентраций бенз(а)пирена ($\text{мкг}/\text{л}$) в снеге вдоль маршрутов отбора проб: *a* – северо-восточное направление; *b* – северное направление; — – результат численного моделирования; ○, ● – опорные и контрольные точки измерений

Из анализа рис. 2, *a* вытекает удовлетворительное согласие измеренных и вычисленных концентраций в контрольных точках с номерами 2, 4, 5. Максимум приземной концентрации достигается на расстоянии менее 0,5 км от трубы, что указывает на весьма высокие скорости оседания выбрасываемых частиц. Оценки показывают, что в рассматриваемом диапазоне расстояний скорости их оседания достигают нескольких метров в секунду.

На рис. 2, *b* приведены результаты численного восстановления поля концентрации БП в северном направлении от источника. Оценивание параметра θ_1 проводилось с использованием одной опорной точки

измерений. Значения параметров θ_2 , θ_3 соответствовали значениям, полученным для северо-восточного направления. Различие численно восстановленных и измеренных значений концентраций БП в контрольных точках с номерами 8–10 не превышает 10–15%. Анализ рис. 2, б дает дополнительное подтверждение адекватности описания процесса выпадения полидисперсной примеси в окрестности электродного завода на основе предложенной модели оценивания (4)–(6).

Заключение

В рамках кинематической схемы оседания крупных частиц примеси в атмосфере разработана мало-параметрическая модель реконструкции поля выпадений в полидисперсном приближении, что позволяет проводить численный анализ данных наблюдений в диапазоне расстояний до 3–4 км от источника. Апробация модели показала вполне удовлетворительное согласие с данными экспериментальных исследований загрязнения снегового покрова в зоне влияния высотного источника выброса крупнодисперсных фракций примеси. Следует отметить, что при построении модели оценивания полей выпадений аэрозолей весьма существенную роль играют предварительные априорные сведения о параметрах источника и характеристиках дисперсного состава примеси. Значительные выпадения бенз(а)пирена в ближних окрестностях электродного завода происходят в составе крупных фракций частиц, что указывает на практическое отсутствие очистки выбрасываемых в атмосферу примесей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 16, интеграционного проекта СО РАН № 84.

1. Безуглова Н.Н., Букатый В.И., Сукалов Ю.А., Сукалов К.Ю., Суторихин И.А. Восстановление поля концентраций аэрозоля, выпавшего на снег за зимний период в окрестностях ТЭЦ-2 г. Барнаула // Оптика атмосф. и океана. 2007. Т. 20. № 7. С. 622–626.

V.F. Raputa, S.E. Olkin, I.K. Reznikova. A model for evaluation of benzo(a)pyrene aerosole polutions in Novosibirsk electrode plant surroundings.

A model for quantitative interpretation of route observations of fallout areas in surroundings of one-point source is proposed in the framework of kinematic scheme of description of heavy polydisperse impurity propagation in the atmosphere. Numerical analysis of experimental data of benz(a)pyrene pollution of snow-cover, obtained at the end of winter, 2008, in Novosibirsk electrode plant surroundings, has been performed based on this model. The model showed that most heavy polutions of benzo(a)pyrene were in the fraction of large particles obtained in close surroundings of height chimney.

2. Янченко Н.И., Макухин В.Л., Баранов А.Н. Экспериментальные исследования и численное моделирование процессов распространения фтора в регионе г. Братск // Оптика атмосф. и океана. 2008. Т. 21. № 10. С. 841–843.
3. Бородуллин А.И., Десятков Б.М., Лаптева Н.А., Шабанов А.Н. Определение границ облака распространяющихся атмосферных примесей // Оптика атмосф. и океана. 2007. Т. 20. № 1. С. 86–89.
4. Юдин М.И. К теории рассеяния тел конечных размеров в турбулентной атмосфере // Докл. АН СССР. 1945. Т. 49. № 8. С. 584–587.
5. Смит Ф.Б. Турбулентное рассеяние облака тяжелых частиц // Атмосферная диффузия и загрязнение атмосферы. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1962. С. 217–235.
6. Дунский В.Ф., Никитин Н.В., Соколов М.С. Пестицидные аэрозоли. М.: Наука, 1982. 287 с.
7. Берлянд М.Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 272 с.
8. Бызова Н.Л., Гаргер Е.К., Иванов В.Н. Экспериментальные исследования атмосферной диффузии и расчеты рассеяния примеси. Л.: Гидрометеоиздат, 1991. 279 с.
9. Петрова Г.М., Мирошкина А.Н. Закономерности рассеяния аэрозольных частиц в свободной атмосфере // Тр. ИПГ. М.: Гидрометеоиздат, 1967. Вып. 4. С. 5–40.
10. Петров В.Н., Прессман А.Я. Оценка влияния турбулентного рассеяния по вертикалам и в направлении ветра на распространение полидисперсной примеси // Докл. АН СССР. 1962. Т. 146. № 1. С. 86–88.
11. Прессман А.Я. О распространении в атмосфере тяжелой неоднородной примеси из мгновенного точечного источника // Инж.-физ. ж. 1959. Т. 2. № 3. С. 78–87.
12. Рапута В.Ф. Модели реконструкции полей длительных выпадений аэрозольных примесей // Оптика атмосф. и океана. 2007. Т. 20. № 6. С. 506–511.
13. Климат Новосибирска. Л.: Гидрометеоиздат, 1979. 221 с.
14. Израэль Ю.А. Радиоактивные выпадения после ядерных взрывов и аварий. СПб.: «Прогресс-погода», 1996. 355 с.
15. Успенский А.Б., Федоров В.В. Вычислительные аспекты метода наименьших квадратов при анализе и планировании регрессионных экспериментов. М.: Изд-во МГУ, 1975. 168 с.
16. Даут Г.В. Таблицы интегралов и другие математические формулы. М.: Наука, 1966. 228 с.
17. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента. М.: Наука, 1971. 312 с.