УДК 551.513; 551.509.313

А.Е. Алоян, В.О. Арутюнян, А.А. Лушников, В.А. Загайнов

МЕЗОМАСШТАБНАЯ АТМОСФЕРНАЯ ЦИРКУЛЯЦИЯ И ПЕРЕНОС КОАГУЛИРУЮЩЕГО АЭРОЗОЛЯ НАД БРАТСКОМ

Рассматривается перенос атмосферного аэрозоля воздушными массами на основе модели, учитывающей факторы, влияющие на распределение частиц по размерам: турбулентную диффузию, гидротермодинамические процессы, рельеф подстилающей поверхности, расположение источников выбросов аэрозолей и рост частиц за счет процессов коагуляции. После формулировки системы основных уравнений приводится алгоритм ее численного решения. Модель была применена для воспроизведения ситуации аэрозольного загрязнения атмосферы города Братска летом. Результаты численных расчетов сравниваются с уровнями концентраций субмикронных и высокодисперсных аэрозолей, измеренных в нескольких точках города во время двухнедельной летней экспедиции в 1990 г.

1. Введение

В настоящее время разработан ряд численных модеделей распространения примесей в атмосфере [8, 10, 14, 19 и др.]. Хотя эти модели успешно объясняют многие особенности переноса пассивной примеси в мезомасштабном пограничном слое атмосферы, тем не менее разработка более усовершенствованных моделей для получения надежных результатов, учитывающих изменения спектра размеров аэрозольных частиц, остается важной проблемой. Есть еще одна немаловажная сторона этой проблемы постараться ответить, в какой степени целесообразно модифицировать модели динамики атмосферного аэрозоля. Дело в том, что множество процессов, влияющих на динамику атмосферы, имеют в основном стохастический характер, а это означает, что распределение размеров аэрозольных частиц формируется случайными факторами и никогда не воспроизводится, даже если многократно делать измерения в определенной точке при абсолютно идентичных условиях.

В данной статье рассматривается реалистичная модель для оценки роли антропогенного фактора в образовании уровня аэрозольного загрязнения в атмосфере. Модель включает следующие процессы:

Аэрозоль переносится воздушными потоками, поля скоростей которых восстанавливаются с помощью численного решения системы уравнений гидротермодинамики с учетом ряда неадиабатических факторов, уравнений баланса турбулентной энергии и диссипации и т.д.

Аэрозоль переносится как пассивная примесь, т.е. каждая частица движется вдоль линий потока.

Спектр размеров частиц изменяется процессом коагуляции.

Учитываются локальные источники аэрозольных частиц.

Наряду с основной задачей распространения аэрозоля в атмосфере рассматриваются и сопряженные задачи: исследование функции чувствительности отдельных регионов к аэрозольному загрязнению, а также изучение распространения аэрозольных частиц для оптимального размещения промышленных источников, чтобы в конечном счете минимизировать загрязнения в данном населенном пункте.

2. Основные уравнения

Ниже мы приводим подробную формулировку необходимой системы уравнений, описывающих перенос аэрозоля в атмосфере. Как было отмечено во введении, мы считаем аэрозольные частицы пассивными, следующими строго по потоковым направлениям гидродинамического потока, формирующегося термодинамическим состоянием атмосферы и рельефа местности. Предполагается, что спектр размеров аэрозольных частиц и численная концентрация подвергаются воздействию атмосферной турбулентности и коагуляции аэрозольных частиц. Наша модель включает все эти процессы.

2.1. Уравнение неразрывности

Здесь мы представляем модель, учитывающую перенос и коагуляцию атмосферного аэрозоля, разработанную первоначально в [6]. Исходной точкой нашего подхода является уравнение неразрывности, описывающее перенос пассивных примесей, концентрации которых обозначены $\phi_i(\mathbf{r}, t)$:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \,\varphi_i = F_i(\varphi_i, x, y, z, t), \tag{1}$$

где **u** – вектор скорости потока. Правая часть (1), являющаяся функционалом от φ_i , описывает источники, стоки и химические взаимодействия между загрязнителями, а также другие факторы изменения их концентраций.

Для усреднения уравнения (1) мы представляем функции ϕ и **u** в виде суммы средней по объему и отклонения: $\phi = \overline{\phi} + \phi'$, $u_{\alpha} = \overline{u}_{\alpha} + u'_{\alpha}$, а потоки примеси определим из аппроксимации градиентного вида

$$\overline{u'_{\alpha} \, \varphi'_{i}} = -\,\mu_{\alpha,\beta} \frac{\partial \varphi_{i}}{\partial x_{\beta}} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3).$$
⁽²⁾

Здесь µ_{а,β} – тензор коэффициентов диффузии, а черта – знак усреднения. Предположим, что главные оси тензора совпадают с осями декартовой координатной системы, и тем самым ограничимся учетом только диагональных элементов [13, 17, 20].

В полученном уравнении для отклонения проведем преобразование координатной системы по формуле

$$\sigma = \frac{z - \delta(x, y)}{H - \delta(x, y)} H,$$
(3)

где $\delta(x, y)$ описывает рельеф, а H – верхняя граница интегрирования.

В результате уравнение турбулентной диффузии для переноса полидисперсного аэрозоля с учетом процессов коагуляции для концентраций частиц примет следующий вид [9]:

$$\frac{\partial \varphi_g}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \, \varphi_g = I(\varphi_g, x, y, z, t) + \widetilde{K}_{ij}(\varphi'_i, \varphi'_j) + F_1 + F_2, \quad (4)$$

где

$$F_{1} = \frac{\partial}{\partial x} \mu_{xx} \frac{\partial \mathbf{\varphi}_{g}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_{yy} \frac{\partial \mathbf{\varphi}_{g}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \sigma} \chi_{1} \frac{\partial \mathbf{\varphi}_{g}}{\partial \sigma};$$

$$F_{2} = \frac{\partial}{\partial x} a_{1} \mu_{xx} \frac{\partial \mathbf{\varphi}_{g}}{\partial \sigma} + a_{1} \frac{\partial}{\partial \sigma} \mu_{xx} \frac{\partial \mathbf{\varphi}_{g}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} a_{2} \mu_{yy} \frac{\partial \mathbf{\varphi}_{g}}{\partial \sigma} + a_{2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \mu_{yy} \frac{\partial \mathbf{\varphi}_{g}}{\partial y};$$

$$a_{1} = \widetilde{\delta}_{x} \frac{\sigma - H}{H - \widetilde{\delta}(x, y)},$$
(5)

$$a_2 = \widetilde{\delta}_y \frac{\sigma - H}{H - \widetilde{\delta}(x, y)}, \quad a_3 = \frac{H}{H - \widetilde{\delta}(x, y)};$$
$$\chi_1 = a_1^2 \mu_{xx} + a_2^2 \mu_{yy} + a_3^2 \mu_{\sigma\sigma}.$$

Здесь φ_g – вектор концентраций частиц с массами в интервале (g, g + dg); $K_{ij}(\varphi_i, \varphi_j)$ – матричный оператор, описывающий процессы коагуляции; I(x, y, z, t) – источник новых частиц с размером g; μ_{xx} , μ_{yy} , $\mu_{\sigma\sigma}$ – коэффициенты турбулентной диффузии по направлениям x, y, σ соответственно.

Коэффициенты турбулентной диффузии определяются с помощью одноточечных вторых моментов турбулентных пульсаций в виде функций, зависящих от средних параметров атмосферы, сдвига воздушного потока, стратификации и энергии турбулентности. Функциональная зависимость коэффициентов тензора диффузии от перечисленных выше параметров дана в [8, 13, 17] и используется в [6, 10]. Поэтому уравнение (1) переноса аэрозольных частиц с учетом коагуляции будем решать совместно с уравнением гидротермодинамики атмосферы.

2.2. Уравнения гидротермодинамики атмосферы

Исходную систему уравнений гидротермодинамики будем записывать, учитывая орографические особенности с помощью (3). В новой системе координат уравнения гидротермодинамики в негидростатическом приближении примут следующий вид [1, 8, 9]:

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \,\hat{u} = -\frac{\partial P'}{\partial x} + a_1 \frac{\partial P'}{\partial \sigma} + l \,\hat{v}' + F_u + a_3^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \rho v_u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\hat{u}}{\rho} \right), (6)$$

$$\frac{\partial \hat{v}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \,\hat{v} = -\frac{\partial P'}{\partial y} + a_2 \frac{\partial P'}{\partial \sigma} - l \,\hat{u}' + F_v + a_3^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \rho v_u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\hat{v}}{\rho} \right), (7)$$

$$\frac{\partial \hat{w}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \,\hat{w} = -a_3 \frac{\partial P'}{\partial \sigma} + \lambda \vartheta' (1 + \gamma q) + F_w + a_3^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \rho v_u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\hat{w}}{\rho} \right), (8)$$

$$\frac{\partial \hat{\vartheta}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \,\hat{\vartheta} = -a_3 \frac{\partial P'}{\partial \sigma} + \lambda \vartheta' (1 + \gamma q) + F_w + a_3^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \rho v_u \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\hat{w}}{\rho} \right), (8)$$

$$\frac{\partial \hat{\vartheta}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \,\hat{\vartheta} + \frac{S}{a_3} \left(\hat{w}' + \tilde{\delta}_x \,\hat{u}' + \tilde{\delta}_y \,\hat{v}' \right) = \frac{L_w \Phi \bar{\rho}}{C_p} + F_\vartheta + a_3^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \rho v_\vartheta \,\frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\hat{\vartheta}}{\bar{\rho}} \right), (9)$$

$$\frac{\partial \hat{q}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \,\hat{q} = -a_3 \,\hat{w} \frac{\partial Q}{\partial \sigma} - \Phi \,\overline{\rho} + F_q + a_3^2 \frac{\partial}{\partial \sigma} \rho v_q \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\frac{\hat{q}}{\overline{\rho}} \right), (10)$$

$$\frac{\partial \hat{u}'}{\partial x} + \frac{\partial \hat{v}'}{\partial y} + \frac{\partial \hat{w}'}{\partial \sigma} = 0;$$
(11)
$$u = U + u'; v = V + v'; w = W + w';$$

$$\vartheta = \Theta + \vartheta'; q = Q + q'; p = P + p'.$$

(Большими буквами обозначены крупномасштабные составляющие метеорологических полей, буквами со штрихом – отклонения). Здесь приняты следующие обозначения:

$$a_{1} = \tilde{\delta}_{x} \frac{\sigma - \hat{H}}{H - \tilde{\delta}(x, y)}, \quad a_{2} = \tilde{\delta}_{y} \frac{\sigma - \hat{H}}{H - \tilde{\delta}(x, y)}, \quad a_{3} = \frac{\hat{H}}{H - \tilde{\delta}(x, y)};$$

div $\mathbf{u} \,\hat{\phi} = \frac{\partial u \hat{\phi}}{\partial x} + \frac{\partial v \hat{\phi}}{\partial y} + \frac{\partial w \hat{\phi}}{\partial \sigma}; \quad \hat{\phi} = \rho \phi,$
 $\phi = (u, v, w, \vartheta', q');$

$$\widetilde{\delta}_x = \frac{\partial \widetilde{\delta}}{\partial x}, \quad \widetilde{\delta}_y = \frac{\partial \widetilde{\delta}}{\partial y}, \quad w = a_1 u + a_2 v + a_3 w;$$

$$F_{u} = \frac{\partial \tau_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{12}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \sigma} (a_{1} \tau_{11} + a_{2} \tau_{12}), \qquad (12)$$

$$F_{v} = \frac{\partial \tau_{21}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{22}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \sigma} (a_{1} \tau_{21} + a_{2} \tau_{22}),$$

$$F_{w} = \frac{\partial \tau_{31}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{32}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \sigma} (a_{1} \tau_{31} + a_{2} \tau_{32}),$$

$$F_{9} = \frac{\partial H_{1}}{\partial x} + \frac{\partial H_{2}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \sigma} (a_{1} H_{1} + a_{2} H_{2}),$$

$$F_{q} = \frac{\partial Q_{1}}{\partial x} + \frac{\partial Q_{2}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \sigma} (a_{1} Q_{1} + a_{2} Q_{2}),$$

где *t* – время; *u*, *v*, *w* – компоненты вектора скорости ветра в направлении координат *x*, *y*, σ ; **u** = (*u*, *v*, *w*); 9 – потенциальная температура; ρ – плотность; *l* – параметр Кориолиса; *q* – удельная влажность; *L_w* – скрытая теплота конденсации; Φ – скорость образования жидкой фазы; *S* – параметр стратификации; $\lambda = g/T$ – параметр плавучести; $\gamma = 0,61$; $\overline{\rho}(z)$ – фоновая плотность; τ_{ij} , *H_i*, *Q_i* (*i* = 1, 2, 3; *j* = 1, 2) – тензор вязких напряжений Рейнольдса и турбулентные потоки тепла, влаги; *v_u*, *v₉*, *v_q* – вертикальные коэффициенты турбулентности для моментов количества движения, тепла и влаги.

Для описания структуры приземного слоя используем теорию подобия Монина–Обухова и эмпирические функции Бузингера [7, 11]. При условии сильной неустойчивости для аппроксимации вертикальных профилей метеорологических полей в приземном слое, примем «закон-1/3», а при сильной устойчивости, как и в [7, 11], – линейную зависимость. Окончательно модель приземного слоя запишем в следующем виде:

$$\begin{split} \mathfrak{a} z \, \frac{\partial \left| \mathbf{u} \right|}{\partial z} &= u_* \, \varphi_u(\zeta), \quad \mathfrak{a} \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial z} = \widetilde{P}_* \, \varphi_9(\zeta) \quad (P = 9, q); \\ \mathfrak{a} &\left| \mathbf{u} \right| = u_* f_u(\zeta, \zeta_u); \quad P - P_0 = \widetilde{P}_* f_9(\zeta, \zeta_u); \\ \zeta &= \zeta/L; \, \zeta_h = h/L; \quad (13) \\ v_i &= \frac{u_* \, \mathfrak{a} \, z}{u_i(\zeta)}, \quad (v_i)_h = \frac{u_* \, \mathfrak{a} \, H}{\varphi_i(\zeta_h)}; \\ a_i &= \frac{\varphi_i(\zeta)}{f_i(\zeta_h, \zeta_i)}; \, L = \frac{u_*^2}{\mathfrak{a}^2 \, \lambda \varphi_*} \, (i = u, \varphi); \end{split}$$

$$f_u(\zeta,\,\zeta_0)=\int\limits_{\zeta_0}^{\zeta}\frac{\varphi_u(\zeta)}{\zeta}\,d\zeta;\ f_\vartheta(\zeta,\,\zeta_0)=\int\limits_{\zeta_0}^{\zeta}\frac{\varphi_\vartheta(\zeta)}{\zeta}\,d\zeta,$$

где $|\mathbf{u}| = (u^2 + v^2)^{1/2}$ – модуль вектора скорости; u_* – скорость трения; ϑ_* , q_* – масштабы потенциальной температуры и удельной влажности; h – высота приземного слоя; L – масштаб длины; z_u , z_ϑ – параметры шероховатости для ветра и температуры; ζ – безразмерная высота, представляющая собой параметр гидростатической устойчивости; φ_i , f_i – направленные универсальные функции. В приземном слое при этом будем учитывать поправку к потенциальной температуре за счет влаги. При этом несколько изменится значение масштаба длины L. Введем масштаб длины $L_* = L (J_* + 1)$ и соответственно безразмерную высоту $\zeta^* = z/L_* = \zeta(1 + J_*)$, где $J_* = 0.61 T(q_h - q_{z_0})/(\vartheta_h - \vartheta_{z_0})$ – безразмерное число, являющееся мерой относительной значимости эффектов стратификации влажности и температуры. Систему уравнений (6)–(13) будем решать в области $D_t = D \times [0, T]$, $D = \{(x, y, \sigma): x \in [-X, X], y \in [-Y, Y], \sigma \in [0, H]\}$ при следующих начальных и краевых условиях:

$$\hat{u}' + \hat{v}' + \hat{w}' = 0; \ \hat{\mathfrak{S}}' = 0; \ \hat{q}' = 0 \ \text{при} \ t = 0;$$
 (14)

$$\frac{\partial \hat{u}'}{\partial x} = \frac{\partial \hat{v}'}{\partial x} = \frac{\partial \hat{w}'}{\partial x} = 0, \ \frac{\partial \hat{\vartheta}'}{\partial x} = 0, \ \frac{\partial \hat{\vartheta}'}{\partial x} = 0, \ \frac{\partial \hat{q}'}{\partial x} = 0 \ \text{при} \ x = \pm X; (15)$$

$$\frac{\partial \hat{u}'}{\partial y} = \frac{\partial \hat{v}'}{\partial y} = \frac{\partial \hat{w}'}{\partial y} = 0, \ \frac{\partial \hat{\vartheta}'}{\partial y} = 0, \ \frac{\partial \hat{\vartheta}'}{\partial y} = 0, \ \frac{\partial \hat{q}'}{\partial y} = 0 \ \text{при} \ y = \pm Y; (16)$$

$$\hat{u}' = \hat{v}' = \hat{w}' = 0; \ \hat{\vartheta}' = 0; \ \hat{q}' = 0$$
 при $\sigma = H;$ (17)

$$a_{3}h\frac{\partial\hat{u}}{\partial\sigma} = a_{u}\hat{u}, \quad a_{3}h\frac{\partial\hat{v}}{\partial\sigma} = a_{u}\hat{v}, \quad a_{3}h\frac{\partial\hat{9}}{\partial\sigma} = a_{9}(\hat{9} - \hat{9}_{0}),$$
$${}_{3}h\frac{\partial\hat{q}}{\partial\sigma} = a_{9}(\hat{q} - \hat{q}_{0}); \quad \frac{\partial\hat{w}}{h} = -\left(\frac{\partial\hat{u}}{\partial x} + \frac{\partial\hat{v}}{\partial y}\right)$$

при
$$\sigma = \frac{(h - \hat{\delta}(x, y))\hat{H}}{H - \hat{\delta}(x, y)};$$
 (18)

$$\hat{w}' = 0$$
 при $\sigma = 0$.

Температура на подстилающей поверхности определяется из уравнения теплового баланса.

2.3. Параметризация турбулентной диффузии подсеточного масштаба

Правая часть (6)–(13) содержит пока еще не определенные функции. Ниже приводятся полуэмпирические выражения для них. Следуя работам [8, 12], симметричный тензор напряжения $\tau_{i,j}$ представим в виде функции, зависящей от тензора деформации *D* среднего движения следующим образом:

$$\tau_{i,j} = \overline{\rho} \, K_M D_{i,j},\tag{19}$$

где $D_{i,j}$ – тензор деформации,

$$D_{i,j} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \,\delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (i = 1, 2; j = 1, 2),$$

и поток тепла определим по формуле

$$H_j = \overline{\rho} \ K_H \frac{\partial \Theta}{\partial x_j}.$$
 (20)

Здесь K_M и K_H – параметры кинематической вязкости и диффузии ($K_M/K_H = 1/Pr \approx 3$). Для определения пространственно-временных изменений коэффициента K_M будем пользоваться следующей формулой:

а

$$K_{M} = \begin{cases} (\widetilde{K} \overline{\Delta})^{2} | \operatorname{Def} |, & \operatorname{если} \operatorname{Ri} > 1, \\ (\widetilde{K} \overline{\Delta})^{2} | \operatorname{Def} | (1 - (K_{H}/K_{M}) \operatorname{Ri}), & \operatorname{если} \operatorname{Ri} \leq 1, \end{cases}$$
(21)

где $\overline{D} = A^{1/2}$; $A = \Delta x \Delta y$; K – числовая константа. Деформацию Def определим по формуле

$$(\text{Def})^2 = \frac{1}{2} \operatorname{Sp} D^2 = (D_{11}^2 + D_{22}^2 + D_{33}^2) + D_{12}^2 + D_{13}^2 + D_{23}^2.$$
(22)

Число Ричардсона Ri представим в следующем виде:

$$\operatorname{Ri} = \frac{g}{\Theta} \frac{\partial \vartheta}{\partial z} / (\operatorname{Def})^2.$$

При проведении численных расчетов, когда горизонтальные масштабы исследуемых процессов больше, чем по вертикали, используется некоторый комбинированный метод, а именно: горизонтальные коэффициенты турбулентного обмена определяются из (19), (20), (21), а вертикальные – из уравнения баланса энергии турбулентности и диссипации:

$$\frac{\partial b}{\partial t} + \mathbf{u} \operatorname{grad}(b) = \mathbf{v}_{u} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^{2} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^{2} - \lambda \alpha_{T} \left(\frac{\partial \mathbf{9}'}{\partial z} + S \right) - \lambda \alpha_{q} \frac{\partial q}{\partial z} \right] + a_{b} \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{v}_{u} \frac{\partial b}{\partial z} - c \frac{b^{2}}{\mathbf{v}_{u}}, \qquad (23)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \mathbf{u} \operatorname{grad}(\varepsilon) = \alpha_1 \frac{\varepsilon}{b} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 - \alpha_{\theta_r} \frac{\partial \theta'}{\partial z} - \alpha_{\theta_c} \frac{\partial q}{\partial z} \right] + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial z} \operatorname{v} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} - \alpha_3 \frac{\varepsilon^2}{b}, \qquad (24)$$

где $\alpha_T = \nu_9/\nu_u = \varphi_u(\zeta)/\varphi_9(\zeta), a_b$ и *с* – константы.

Уравнения будем решать при следующих начальных и краевых условиях [8]:

$$b = 0, \varepsilon = 0 \text{ при } t = 0,$$

$$b = b_u^2(\zeta_h, \zeta_0), \varepsilon = \varepsilon_h(\zeta_h, \zeta_0) \text{ при } z = h,$$

$$b = 0, \varepsilon = 0 \text{ при } z = H.$$
(25)

Вид функций $b_u^2(\zeta_h, \zeta_0)$ и $\varepsilon = \varepsilon_h(\zeta_h, \zeta_0)$ и способы их определения даны в [2].

2.4. Коагуляция

Перенос аэрозолей в атмосфере всегда сопровождается процессом роста частиц. Изменение концентрации и спектра размеров частиц описывается уравнением Смолуховского

$$\frac{\partial \phi_g}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^g \tilde{K}(g, g_1) \, \phi_{g_-g_1} \, \phi_{g_1} \, dg_1 - \\ - \, \phi_g \int_0^\infty \tilde{K}(g, g_1) \, \phi_{g_1} \, dg_1 + I(\phi_g, t),$$
(26)

где g_1 – текущая переменная (масса), по которой производится интегрирование; φ_g – концентрация частиц с массой, заключенной интервалами от g до g + dg; $\tilde{K}(x, y)$ – частота столкновения частиц с массами x и y; $I(\varphi_g, t)$ – интенсивность образования новых частиц с массой g. Этот член добавляется в правую часть (1). Первый член в правой части (1) описывает приход частиц в размер g за счет коагуляции меньших частиц, второй – уход частиц из размера gза счет коагуляции со всеми остальными частицами.

Систему уравнений (1), (4), (5) будем решать в области

$$D_t = D \times [0, T], D = \{(x, y, \sigma) : x \in [-X, X], y \in [-Y, Y], \\ \sigma \in [0, H] \}$$

при следующих начальных и краевых условиях:

$$\varphi_g\Big|_{t=0} = \varphi_g^0;$$

$$\frac{\partial \varphi_g}{\partial x} = 0 \text{ при } x = \pm X, \quad \frac{\partial \varphi_g}{\partial y} = 0 \text{ при } y = \pm Y; \quad (27)$$
$$\varphi_g = \varphi_{BG} \text{ при } \sigma = H,$$

где ϕ_{BG} – фоновая концентрация частиц.

На нижней границе области интегрирования краевое условие зададим в следующем параметризованном виде:

$$a_{3} \frac{\partial \varphi_{g}}{\partial \sigma} = \frac{a_{\vartheta} \left(\tilde{\beta}_{g} - f_{s} \right)}{\tilde{\beta}_{g} + a_{\vartheta} \,\mu_{ss}} \operatorname{прu} \sigma = \frac{h - \tilde{\delta}}{H - \tilde{\delta}} H.$$
(28)

Здесь $\tilde{\beta}_g = \beta_g u_* - \omega_g$, β_g характеризует взаимодействие примесей с подстилающей поверхностью; *X*, *Y* – боковые границы области интегрирования по пространственным переменным *x* и *y* соответственно; $f_g(x, y, t)$, $(g = \overline{1, n})$ описывает источники примеси на уровне шероховатости; ϕ_{gh} – концентрация аэрозольных частиц на верхней границе приземного слоя.

Решение задачи (4)–(26) будем искать на множестве неотрицательных решений. Предполагается, что сталкиваются частицы шарообразной формы и длина свободного пробега в газе-носителе намного больше их размера. В этом случае K(x, y) можно представить в следующем виде [18]:

$$\widetilde{K}(x,y) = A(x^{1/3} + y^{1/3}) (D_x + D_y) \beta_{xy},$$
(29)

где *D*_{*x*} – коэффициент диффузии частицы массы *x*:

$$D_x = \frac{k_B T}{6\pi\eta R_x} \left[1 + Kn_x \left(A + Q \exp\left(-\frac{b_3}{Kn_x}\right) \right) \right]; \quad (30)$$

 k_B – постоянная Больцмана; b_3 , A, Q – эмпирические постоянные; A = 1,25; Q = 0,4; $b_3 = 1,1$. Фактор коррекции β_{xy} определяется из [18]:

$$\beta_{xy} = \left(\frac{R_x + R_y}{R_x + R_y + d_{xy}} + \frac{4(D_x + D_y)}{(V_x^2 + V_y^2)^{1/2}(R_x + R_y)}\right)^{-1};$$
 (31)

$$Kn_{x} = \frac{l_{x}}{R_{x}}; d_{xy} = (d_{x}^{2} + d_{y}^{2})^{1/2},$$

$$d_{x} = \frac{1}{6 R_{x} l_{x}} ((2 R_{x} + l_{x})^{3} - (4 R_{x}^{2} + l_{x}^{2})^{3/2}) - 2R_{x};$$

$$l_{x} = \frac{8D_{x}}{\pi V_{x}}; V_{x} = \left(\frac{8kT}{\pi x}\right)^{1/2}; x = \frac{4}{3}\pi R_{x}^{3}\rho.$$

Здесь D_x — коэффициент диффузии частицы *i* с радиусом R_x ; T — температура; l_x — средняя длина пробега; V_x — средняя скорость частицы; x — масса частицы; ρ — плотность частицы; η — вязкость газа.

3. Сопряженная задача

В задачах охраны окружающей среды главная цель состоит в том, чтобы получить оценки глобальных характеристик, зависящих скорее от функционалов полей концентраций частиц, чем от самих полей. Например, таких характеристик, как общее оседание частиц в данном регионе, экономический ущерб от аэрозольного загрязнения окружающей среды и т.д., которые линейно зависят от спектра размеров частиц. Конечно, все эти значения могут находиться решением описанной выше прямой задачи. Однако это не является наилучшим способом достижения конечной цели. Существует более универсальный метод с использованием сопряженных функций [4], который будет применен для оценки аэрозольного загрязнения в Братском регионе и для оптимального размещения промышленных источников. Для простоты предполагается, что $K_{ii}(\phi_i, \phi_j) = 0$, т.е. примесь пассивная.

Напишем (4) в операторной форме:

$$L\varphi = I_g(x, y, z, t), \tag{32}$$

где

$$L\varphi = \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \frac{\partial u\varphi}{\partial x} + \frac{\partial v\varphi}{\partial y} + \frac{\partial w\varphi}{\partial \sigma} - F_1 - F_2, \qquad (33)$$

а *I_g* описывает источники загрязнения.

Рассмотрим сопряженный оператор *L** с помощью тождества Лагранжа:

$$(\varphi^*, L\varphi) = (\varphi, L^*\varphi^*). \tag{34}$$

При div $\mathbf{u} = 0$ сопряженный оператор имеет следующий вид:

$$L^* \varphi = -\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} - \frac{\partial u \varphi^*}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi^*}{\partial y} + \frac{\partial w \varphi^*}{\partial \sigma} - F_1 - F_2.$$
(35)

Рассмотрим сопряженную задачу

$$L^* \varphi^* = p_k, \tag{36}$$

где p_k – неотрицательная функция, зависящая от *x*, *y*, *z*, *t*; *k* принадлежит непустому множеству значений. Соответствующие краевые условия таковы:

$$\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} = 0 \operatorname{пpu} |x| = X; \tag{37}$$

$$\frac{\partial \varphi^*}{\partial y} = 0 \operatorname{пpu} |y| = Y; \tag{38}$$

$$\varphi^* = 0$$
 при $\sigma = H;$
(39)

$$a_{3}\frac{\partial \phi^{*}}{\partial \sigma} = \frac{a_{9}\beta}{\beta + a_{9}\mu_{\sigma\sigma}} \quad \text{при } \sigma = \frac{h - \tilde{\delta}}{H - \tilde{\delta}}; \qquad (40)$$

$$\varphi^*(t=T) = 0. \tag{41}$$

Для обеспечения корректности задачи (36)–(41) и устойчивости численного алгоритма задача решается обратно по времени: от t = T до t = 0. Для определенности начальное условие пишется при t = T. Обозначим полученное решение через φ_k^* . Теперь умножим (34) на φ^* , проинтегрируем и вычтем. Учитывая тождество Лагранжа, приходим к другому представлению:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi,\varphi_k^*) = (I,\varphi_k^*) - (p_k,\varphi).$$
(42)

Проинтегрировав (42) по времени от t = 0 до t = T, с учетом начального условия для ϕ_k^* и ϕ , окончательно получаем

$$\int_{0}^{T} dt \int_{D} p\varphi \, dD = \int_{D} I\varphi^* \, dD + \int_{0}^{T} dt \int_{-X}^{+Y} dx \int_{-Y}^{+Y} a_3 \, \varphi_0 \, \varphi^* \Big|_{z=h} \, dy.$$
(43)

Значение *p_k* зададим следующим образом:

$$p_k = \begin{cases} 1, & (x, y, z) \in \omega_k, \\ 0, & (x, y, z) \notin \omega_k, \end{cases}$$
(44)

где $\omega_k \subset D$ – подобласть, где общая концентрация загрязнителей должна быть оценена (т.н. «охраняемая зона»). Можно легко увидеть, что левая часть (43) определяет концентрацию загрязнителей, приходящих в ω_k в интервале времени [0, *T*]. Поэтому общая концентрация в некоторой части региона *D* может быть получена решением либо прямой задачи (4), (27), либо сопряженной задачи (36)–(41). При этом функция ϕ_k^* дает ту часть загрязнения, которая приходит в охраняемую зону ω_k от источника. Способы построения таких моделей и их использование для решения задач окружающей среды приведены в [5, 8].

4. Численное решение

Численные методы для решения (4)–(5) разработаны в [8]. Авторы дают численное решение гидротермодинамических уравнений (6)–(11) и уравнения переноса химически реагирующих примесей, которые включаются в правую часть. С этой точки зрения выражение для коагуляции в (26) ничего нового не требует, разве что его численное решение является гораздо более сложным, и поэтому возникает необходимость в некоторых преобразованиях. При этом они должны удовлетворять следующим требованиям: во-первых, должен быть охвачен, насколько возможно, широкий спектр частиц, во-вторых; численная схема должна достаточно экономно использовать ресурсы компьютера. С этой целью спектр размеров частиц берется следующим образом.

Вводится частица предельной массы G, которая при дальнейшей коагуляции выводится из системы. Пока масса самой крупной фракции пренебрежимо мала по сравнению с массой всей системы, отток массы из последней фракции мал, но когда он становится сопоставимым со всей массой системы, то убыль массы системы через последнюю фракцию становится заметной. Это можно рассматривать как естественный для системы сток частиц, например за счет гравитационного осаждения.

Интервал (0, G) разбивается на фракции в логарифмическом масштабе путем удвоения масс $2g_i = g_{i+1}$.

Количество частиц в *i*-й фракции N_i удовлетворяет уравнению, которое получается после интегрирования (26) в интервале масс (g_i, g_{i+1}):

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq 1}^{i-2} \widetilde{K}_{i-1,j}^1 N_{i-1,j} N_j + \frac{1}{2} \widetilde{K}_{i-1,i-1}^0 N_{i-1}^2 + \sum_{j=1}^{i-1} (\widetilde{K}_{ij}^0 - \widetilde{K}_{ij}^1) N_i N_j - \sum_{j=1}^{I} \widetilde{K}_{ij}^0 N_i N_j , \qquad (45)$$

с начальными условиями

$$N_i (t=0) = N_i^0, (46)$$

где

$$\widetilde{K}_{ij}^{1} = (g_{i+1} - g_{i})^{-1} (g_{j+1} - g_{j})^{-1} \int_{x+y}^{g_{i+1}} \int_{x+y}^{g_{j+1}} \widetilde{K}(x, y) \, dx \, dy; \qquad (47)$$

$$\widetilde{K}_{ij}^{0} = (g_{i+1} - g_{i})^{-1} (g_{j+1} - g_{j})^{-1} \int_{g_{i}}^{g_{i+1}} \int_{g_{j}}^{g_{j+1}} \widetilde{K}(x, y) \, dx \, dy.$$
(48)

При аппроксимации для получения (45) предполагается, что *К* заменяются их средними значениями

К на соответствующих интервалах масс ((46)-(47)).

В правую часть уравнения (1) можно включить члены, описывающие источник новых частиц $I(g, \mathbf{r}, t)$ произвольной формы и сток частиц. Полагаем, что источник генерирует частицы самой мелкой фракции; в дальнейшем этот источник имитирует возникновение новых частиц за счет нуклеации.

При применении предложенной модели необходимо следить за сохранением массы в системе. Дело в том, что если при удвоении массы, как это сделано в нашем случае, использовать 30 фракций, то в коагуляции будет участвовать диапазон масс частиц более 9 порядков. Таким образом, если мы будем удерживать по счетной концентрации точность даже в 6 порядков, то по массовой концентрации этого недостаточно, так как небольшая погрешность в счетной концентрации в крупных фракциях может вызвать заметные массовые погрешности для системы в целом. Можно избежать этих трудностей, если исходное уравнение представить для массовых концентраций. Оно получается сходным образом: умножая уравнение (26) на g, после несложных преобразований получим следующее эволюционное уравнение для массовых концентраций:

$$\frac{\partial m_g}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^g (\widetilde{K}^m (g_1, (g - g_1))) + \widetilde{K} ((g - g_1), g_1)) m_{g_1} m_{g - g_1} dg_1 - m_g \int_0^\infty \widetilde{K} (g, g_1) m_g dg_1 ,$$
(49)

где

$$g\varphi_g = m_g^0; \ \widetilde{K}^m(x, y) = \widetilde{K}(x, y) y^{-1}$$

Соответственно начальное условие примет вид

$$m_g \mid_{t=0} = m_g^0.$$

Далее проинтегрируем обе части уравнения (26) в пределах *i*-й фракции от *g* до g_{i+1} , вынесем из-под знака интеграла среднее произведение масс \overline{m}_i и \overline{m}_j и получим

$$\frac{\partial M_g}{\partial t} = \sum_{j=1}^{i-2} \left(\widetilde{K}_{i-1,j}^{m,1} + \widetilde{K}_{j,i-1}^{m,1} \right) M_i M_j + \widetilde{K}_{i-1,i-1}^{m,0} M_{i-1}^2 + \sum_{j=1}^{i-1} \left(\widetilde{K}_{ij}^{m,0} - \widetilde{K}_{ij}^{m,1} + \widetilde{K}_{ij}^{m,0} - \widetilde{K}_{ji}^{m,0} \right) M_i M_j - \sum_{j=1}^{I} \widetilde{K}_{ij}^{m,0} M_i M_j$$
(50)

с начальными условиями

$$M_i \big|_{t=0} = M_i^0, \tag{51}$$

где

$$\widetilde{K}_{ij}^{1} = (g_{i+1} - g_{i})^{-1} (g_{j+1} - g_{j})^{-1} \int_{x+y}^{g_{i+1}} \int_{x+y}^{g_{i+1}} \widetilde{K}(x, y) y^{-1} dx dy; \quad (52)$$

$$\widetilde{K}_{ij}^{0} = (g_{i+1} - g_{i})^{-1} (g_{j+1} - g_{j})^{-1} \int_{g_{i}}^{g_{i+1}} \int_{g_{j}}^{g_{j+1}} \widetilde{K}(x, y) y^{-1} dx dy.$$
(53)

Проконтролировать решение описанной задачи довольно просто, поскольку если решение корректно, то полная масса системы должна сохраняться, а если в системе имеются источники и стоки, то закон сохранения массы должен выполняться с учетом этих источников и стоков. Такие процедуры были проделаны [3], и оказалось, что концентрация частиц системы в относительных единицах сохраняется с точностью до 10^{-4} (для количества частиц) и 10^{-2} для массовой концентрации. Поэтому численная схема может быт использована для более сложных вычислений.

Численный алгоритм решения этой задачи основан на использовании метода расщепления по физическим процессам, и на каждом малом интервале времени $[t_j, t_{j+1}]$ длиной Δt рассмотрим следующую схему, состоящую из трех основных этапов: 1) перенос аэрозольной субстанции по траекториям; 2) турбулентная диффузия; 3) локальное изменение дисперсности аэрозоля из-за коагуляции. Численный алгоритм и метод решения задачи приведены в [4, 8, 9].

На базе описанных выше моделей выполнена серия численных экспериментов по исследованию механизмов формирования метеорологического режима в регионе и по оценке антропогенного влияния источников загрязняющих примесей в газовой и аэрозольной фазах на качество атмосферы г. Братска. Методика численных экспериментов основывается на расчете сценариев, отражающих наиболее характерные и типичные черты исследуемых процессов.

Расчеты проводились при следующих значениях входных параметров: $30 \times 30 \times 15$ – число узлов сеточной области X = Y = 72,5 км; H = 1550 м; $\Delta x = \Delta y = 2,5$ км; $z = z_0$, 10, 20, 30, 40, 50, 100, 200, 300, 450, 600, 750, 900, 1100, 1300, 1500 м – высоты координатных поверхностей; $\Delta t = 10$ мин – шаг по времени.

Оценивалось аэрозольное загрязнение атмосферы от источников, расположенных в г. Братске и окружающем его регионе. Каждый источник в модели представляет собой агрегированный источник, объединяющий выбросы нескольких источников. В выбросах задается лишь мощность частиц для первой аэрозольной фракции с радиусом 10 Å, и дальнейшая их трансформация моделируется под влиянием механизмов переноса, диффузии и коагуляции. Источники выброса аэрозолей расположены в плоскости x, y в двух точках с координатами $x_1 = 27,5$ км, *y*₁ = 32,5 км и *x*₂ = 37,5 км, *y*₂ = 32,5 км. В этих точках учитывается вертикальное распределение всех источников на высотах z = 10, 20, 30, 40, 100 м. Локальная шкала времени привязана к местному времени г. Братска. Начальный момент времени в сценариях соответствует 6 ч местного времени. Из анализа карты розы ветров следует, что наиболее характерным для данного региона является западное направление ветра, поэтому эксперименты проводились при следующих значениях фонового потока, заданных на высоте 1500 м: $U_{\phi} = 4$ и 0 м/с.

5. Экспериментальное исследование аэрозолей атмосферы

Измерения концентраций и спектров размеров атмосферных аэрозолей над г. Братском проводились летом 1990 г. Для измерений уровней концентрации и дисперсного состава аэрозолей атмосферы использовался диффузионный аэрозольный спектрометр [15]. Он представляет собой систему, состоящую из трех основных компонентов:

 диффузионных батарей с укрупнителем, позволяющим измерять спектры размеров высокодисперсных аэрозолей (размером до 0,003 мкм);

2) лазерного аэрозольного спектрометра, дающего возможность измерять концентрацию и спектры размеров субмикронных частиц (размером от 0,15 до 3 мкм);

3) персонального компьютера, управляющего всей системой и создающего банк данных.

Измерения диффузионным спектрометром производятся в режиме реального времени в определенной точке пространства, время одного измерения составляет 4–5 мин. В результате одного такого измерения определяются 1) полная концентрация аэрозолей в интервале размеров от 0,003 до 1 мкм; 2) параметры распределения частиц по размерам – средний размер и ширина распределения по размерам высокодисперсных аэрозолей (радиусом до 0,1 мкм); 3) концентрация и гистограмма распределения по размерам субмикронных частиц в интервале размеров от 0,15 до 2,0 мкм, разбитого на 10 интервалов: ($\leq 0,15$), (0,15–0,2), (0,2–0,3), (0,3–0,4), (0,4–0,5), (0,5–0,7), (0,7–1,0), (1,0–1,5), (1,5–2,0), ($\geq 2,0$).

При записи этой информации отмечаются дата и время проведения измерения с точностью до минуты. Эти данные записываются в память компьютера и могут быть впоследствии произвольным образом обработаны. Принципы работы нашей экспериментальной установки более или менее известны и описаны в других работах [16]. Отбираемый из атмосферы воздух вместе с аэрозольными частицами проходит через диффузионные батареи, «проскок» через которые, определяемый как отношение концентрации частиц после их прохождения через батарею к концентрации до прохождения, зависит от их распределения по размерам. Таким образом, на самом деле во время эксперимента измеряются «проскоки» через диффузионные батареи. Для того чтобы извлечь полезную информацию о распределении по размерам аэрозольных частиц, необходимо решить дополнительно обратную задачу, которая сводится к решению интегрального уравнения первого рода. Параметры распределения размеров высокодисперсных частиц получаются с помощью упрощенной версии обратной процедуры, описанной в [16].

При проведении эксперимента непрерывно измерялись спектры размеров аэрозольных частиц в свободной атмосфере. При этом были выбраны 5 точек, в которых проводились измерения в течение нескольких дней в каждой из точек. В результате этого был создан банк данных для 5 точек. Каждое измерение позволяло получить следующие значения: 1) распределение частиц по размерам (аппроксимируемое гаммараспределением); 2) суммарную концентрацию частиц, а также более точное распределение субмикронных частиц. Время одного измерения составляло приблизительно 4 мин, что позволяло получить от 250 до 300 экспериментальных точек за день. Результаты этих измерений были обработаны для того, чтобы получить: 1) изменение по времени суммарной концентрации частиц; 2) изменение по времени концентрации субмикронных частиц; 3) распределение концентрации для заданной точки измерений.

Здесь мы не приводим результаты прямого сравнения между численными и экспериментальными данными: измеренные данные используются только для иллюстрации теоретических расчетов и калибровки вычислений. На самом деле нет точных данных по мощностям выбросов и распределению аэрозолей. Поэтому количественное согласие между численными результатами по модели и экспериментальными данными было достигнуто с помощью вариации мощностей выбросов. Более детальное сравнение этих результатов будет дано в наших последующих работах.

6. Результаты и обсуждение

6.1. Результаты численных расчетов

Была выполнена серия численных экспериментов по исследованию механизмов формирования метеорологического режима в регионе и по оценке антропогенного влияния источников загрязняющих примесей в газовой и аэрозольной фазах на качество атмосферы г. Братска.

Результаты сценарных расчетов с помощью вышеизложенных моделей иллюстрируются рисунками двух типов. Первый тип (рис. 1-3) представляет двумерные разрезы поля течения и изолинии концентрации аэрозоля для восьмой фракции, что соответствует 0,256 мкм, t = 14 ч, z = 10, 50, 450 м (левая половина рисунка) соответственно. В правой части рисунков даны распределения по диаметрам (гистограммы) аэрозольных частиц, образующихся на различных расстояниях от источника (цифры 1-4 в кружочках) и на различных высотах над поверхностью земли. Как видно из рис. 1-3, функция распределения частиц по размерам в различных точках пространства из-за нелинейности процессов коагуляции приводит к различным спектрам частиц. Это, в свою очередь, приводит к тому, что на разных расстояниях от источника процессы аэрозолеобразования имеют существенно нестационарный характер, поэтому осаждение частиц в различных точках будет протекать по-разному.



Рис. 1. Двумерные разрезы поля течения (без фонового потока) и изолинии концентрации аэрозоля для восьмой фракции, что соответствует 0,256 мкм, t = 14 ч, z = 10 м (левая часть). Изолиниям с номерами l-5 соответствуют следующие значения (частицы \cdot см⁻³): $l - 1,22 \cdot 10^5$; $2 - 2,44 \cdot 10^5$; $3 - 3,51 \cdot 10^5$; $4 - 4,89 \cdot 10^5$; $5 - 6,11 \cdot 10^5$. Распределения по диаметрам (гистограммы) аэрозольных частиц, образующихся на различных расстояниях от источника (цифры l-4 в кружочках) и на различных высотах над поверхностью земли (правая часть). Темная область соответствует городской черте Братска



Рис. 2. То же, что и рис. 1, только для z = 50 м и потока 4 м/с. Изолиниям с номерами l-5 соответствуют следующие значения (частицы · см⁻³): $l - 1, 18 \cdot 10^5$; $2 - 2, 35 \cdot 10^5$; $3 - 3, 51 \cdot 10^5$; $4 - 4, 71 \cdot 10^5$; $5 - 5, 88 \cdot 10^5$



Рис. 3. То же, что и рис. 2, только для z = 450 м. Изолиниям с номерами 1-5 соответствуют следующие значения (частицы · см⁻³): $1 - 4,93 \cdot 10^4$; $2 - 9,85 \cdot 10^4$; $3 - 1,48 \cdot 10^5$; $4 - 1,97 \cdot 10^5$; $5 - 2,46 \cdot 10^5$

Второй тип рисунков представляет двумерные разрезы полей функции опасности загрязнения для г. Братска с учетом близлежащих населенных пунктов. Чем больше номер изолинии на этих рисунках, тем выше вклад источников, расположенных в соответствующих участках области, в загрязнение атмосферы над г. Братском и окружающими его населенными пунктами. Зоны наибольшей опасности ограничены изолиниями с номером 7 (масштаб логарифмический). Относительный вклад источников в загрязнение атмосферы над г. Братском имеет вес от 100 до 10%. Область между изолиниями с номерами 7 и 6 соответствует относительному вкладу в загрязнение в нижнем 150-м слое от 10 до 1%, область между изолиниями 6 и 5 – от 1 до 0,1% и т.д.

Анализ информации о функциях опасности источников для качества атмосферы над городом по-

казывает, что эти функции существенно зависят от направления, интенсивности фонового потока и развивающихся под его влиянием локальных циркуляций. При увеличении скорости и изменении направления ветра область влияния соответственно увеличивается и деформируется (рис. 4). Результаты численных экспериментов и натурных исследований показывают, что даже в пределах суток из-за суточного хода атмосферных процессов, величины концентрации аэрозолей могут на порядок изменяться. Отсюда видно, что при фиксированных, не зависящих от текущего состояния атмосферных объемов выбросов добиться выполнения санитарных норм качества атмосферы при существующих в настоящее время технологиях производства практически невозможно, т.е. необходимо улучшить технологии и создать системы управления качеством природной среды с учетом социальных, санитарноэкологических норм и экологических критериев.

6.2. Результаты измерений

На рис. 5 показан суточный ход концентраций высокодисперсной и субмикронной составляющих аэрозолей. Можно просматривать достаточно чет-

кие колебания при переходе к ночному времени; такое поведение атмосферных аэрозолей очень характерно для городской местности и объясняется увеличением антропогенной активности в дневное время и, возможно, некоторыми внутриатмосферными процессами фотохимического перехода газчастица.



Рис. 4. Функции опасности ϕ^* для различных охраняемых зон (отмечены крестиками) Братского региона: одна охраняемая зона (левая часть, $\phi^*_{max} = 2,89 \cdot 10^{-7}$) и две охраняемые зоны (правая часть, $\phi^*_{max} = 2,06 \cdot 10^{-7}$). Зоны наибольшей опасности ограничены изолиниями с номером 7 (масштаб логарифмический). Темная область соответствует городской черте Братска



Рис. 5. Изменение по времени концентраций высокодисперсных (*a*) и субмикронных составляющих аэрозолей (*б*) для 10 июля 1990 г.; *в*, *с* – для 9 июля 1990 г.

Отдельно проводился анализ распределения концентраций субмикронной и высокодисперсной составляющих, смысл которого сводится к определению вероятности появления тех или иных концентраций в отдельных точках местности. Анализ позволяет определить, откуда в эти точки происходит занос повышенных концентраций, и дать характеристику чистоты воздуха в данной точке. Пример такого распределения представлен на рис. 6.

Из рисунка видно, что при попадании в факел выбросов удельный вес больших концентраций резко повышается, что выражается в смещении пика распределения концентраций вправо. В обычных ситуациях этот пик смещен влево или кривая вообще не имеет максимума, монотонно уменьшаясь с повышением концентраций.



Рис. 6. Распределение концентраций аэрозолей для загрязненной зоны г. Братска 10 июля 1990 г.

6.3. Сравнение результатов численных расчетов с измерениями

Интересно сравнить полученные экспериментальные данные с теоретическими расчетами. Такого рода сопоставление должно носить оценочный характер, так как, во-первых, практически невозможно точно воспроизвести наблюдаемые метеорологические условия, а во-вторых, измерения в одной точке носят стохастический характер, моделирование же производилось по детерминированной схеме. Кроме того, при моделировании не учитывались фон предыдущего аэрозоля и предыдущие заносы атмосферного воздуха из соседних регионов. В целом такое сопоставление было использовано в данной работе для того, чтобы оценить мощность выброса источников аэрозольных частиц, т.е. изменением мощности источников добивались согласования экспериментальных и теоретических уровней концентрации и спектров размеров.

Такую нормировку можно рассмотреть на примере заноса факела от Братского лесопромышленного комплекса в район Братской ГЭС. Появление этого факела можно проследить на рис. 5.

Следует отметить, что высокодисперсная составляющая оказалась более чувствительной к загрязнениям, нежели субмикронная, т.е. более реактивной, что видно из рис. $5,a, \delta$. На рис. 5,a представлено изменение концентрации высокодисперсной составляющей аэрозоля. Как видно из этого рисунка, высокодисперсная составляющая уже приняла стационарное значение, тогда как субмикронная составляющая (рис. $5, \delta$) откликнулась на это изменение концентрации только через 4–6 ч.

Расчеты дают при этом полную концентрацию аэрозольных частиц ($N_{\rm max} = 10^5$ см⁻³), в то время как измерения показывают на порядок меньше. Это по-

зволило сделать вывод о том, что предполагаемая мощность источника завышена приблизительно в 3 раза. Дальнейшие сопоставления с измерениями в непосредственной близости от источника позволили подтвердить этот вывод.

7. Выводы

В данной статье показаны некоторые возможности математических моделей для решения задач охраны окружающей среды. Эти достаточно сложные модели являются надежным средством предсказания последствий аэрозольных выбросов как антропогенного, так и естественного происхождения. Несмотря на то, что не все процессы трансформации включены в модель, она тем не менее в состоянии дать разумные результаты нужных характеристик атмосферного аэрозоля.

Данные измерений (проведенные во время летней экспедиции 1990 г.) и результаты численных экспериментов по моделированию загрязнения воздуха г. Братска аэрозольными частицами ведут к следующим основным выводам:

1) Братское водохранилище формирует хорошо определяемую микроклиматическую систему. Орография местности и неоднородность нагрева подстилающей поверхности приводят к развитию сложных местных циркуляций.

2) Концентрации высокодисперсных (0,05 мкм) аэрозолей ($10^4 - 10^6$ см⁻³) превышают фоновые значения на порядок или два, а концентрации субмикронных (0,05–2,0 мкм) аэрозолей изменяются в диапазоне $10^2 - 10^4$ см⁻³, превышая фоновый уровень на несколько порядков.

 Пространственно-временная структура решений сопряженной задачи позволяет определять расположение источников, ответственных за загрязнение заданного района.

4) Хорошее согласие между данными измерений и результатами численных предсказаний суточного хода концентраций аэрозолей подтверждает, что модель может быть успешно использована для оценки производительности источников загрязнения. Для г. Братска она равна 10^8 см³ · c⁻¹.

Наконец, были найдены функции распределения размеров аэрозольных частиц для некоторых точек Братского района. Они характеризуют уровни загрязнения воздуха вблизи источника и на различных расстояниях от него.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 96-05-64733).

Алоян А.Е. Негидростатические численные модели локальных атмосферных процессов. Новосибирск, 1984. 41 с. (Препринт / ВЦ СО АН СССР, № 479).

Алоян А.Е., Лазриев Г.Л. О параметризации энергии турбулентности в приземном слое атмосферы // Мат. модели атмосферных движений. Новосибирск, 1980.

- 3. Лушников А.А., Пискунов В.Н. Три новые точно решаемые модели в теории коагуляции // ДАН СССР. 1982. Т. 268. № 1. С. 132–136.
- Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.
- 5. *Марчук Г.И., Алоян А.Е.* Математическое моделирование в задачах экологии. М., 1989. 36 с. (Препринт / OBM AH CCCP, № 234).
- Марчук Г.И., Алоян А.Е., Лушников А.А., Загайнов В.А. Математическое моделирование переноса аэрозоля в атмосфере с учетом коагуляции. М., 1990. 30 с. (Препринт / OBM АН СССР, № 247).
- 7. Монин А.С., Яглом А.М. Статистическая гидромеханика. М.: Наука, 1965. 640 с.
- Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. М.: Наука, 1985.
- 9. Aloyan A.E., Lushnikov A.A., Makarenko S.V., Marchuk G.I. and Zagainov V.A. // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 1993. N 8. P. 17–30.
- Aloyan A.E., Arutyunyan V.O. and Marchuk G.I. // Russ.J. Num. Anal. Math. Modelling. 1995. N 10. P. 93–114.

Институт вычислительной математики РАН, г. Москва Физико-химический институт им. Л.Я. Карпова, г. Москва

- 11. Businger J.A., Wyngard I.C., Izumi Y. and Bradley E.F. // J.Atmos.Sci. 1971. N 28. P. 181.
- 12. Gal-Chen T. and Somerville C.J. // J. Comp. Phys. 1975. N 17. P. 276.
- 13. Freman B.E. // J.Atmos.Sci. 1977. V. 34. N 1. P. 124-136.
- 14. Lewellen W.S. and Teske M.E. // Boundary Layer Meteorology. 1976. V. 10. P. 69–90.
- 15. Lushnikov A.A., Zagaynov V.A. // J. Aerosol Sci. 1989. N 20. P. 987.
- 16. Lushnikov A.A., Julanov Yu.V. and Zagaynov V.A. // J. Aerosol. Sci. 1993. N 25. P. 533.
- 17. Mellor G.L. and Yamada T. // J. Atmos. Sci. 1974. V. 31. P. 1791.
- Suck S.H. and Brock J.R. Evolution of atmospheric aerosol particle size distribution via Brownian coagulation: numerical simulation // J. Aerosol Sci. 1979. V. 10. P.581–590.
- 19. Yamada T. and Bunker S. // J.Appl.Meteorol. 1988. V. 27. N 5. P. 562–578.
- Yordanov D.L., Aloyan A.E. On the diffusivity tensor in calculating pollution in the planetary boundary layer // Comptes Rend. Acad. Bulgar. Sci. 1981. V. 34. N 7. P. 981–983.

Поступила в редакцию 9 апреля 1997 г.

A.E. Aloyan, V.O. Arutyunyan, A.A. Lushnikov and V.A. Zagaynov. Mesoscale Atmospheric Circulation and Transport of Coagulating Aerosol over Bratsk.

Transport of atmospheric aerosol by air masses is considered on the basis of a realistic model taking into account almost all factors forming the particle size distribution: turbulent diffusion, energy-momentum thermo-hydrodynamic balance, the relief of the substrate surface, location of the sources of aerosols and the particle growth due to coagulation process. After formulating the set of basic equations the procedure of their numerical solution is described. The model is applied for reproducing the aerosol situation over the town of Bratsk in the summer period. The results are compared with the concentration levels of submicron and highly disperse aerosols measured in several points of Bratsk during two week summer expedition in 1990. The model is shown to give reasonable information on the aerosol size spectra in the lower layer of the atmosphere at the heights up to 500 m.