

П.Н. Белов, И.С. Ильин

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ И ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПОЛЕЙ КОНЦЕНТРАЦИЙ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В ГЕОГРАФИЧЕСКИХ РЕГИОНАХ

Представлена стационарная эйлерова усредненная по вертикали модель переноса диоксида серы над территорией Европы. Модель основана на численном решении уравнения переноса (баланса) примеси. Получены, исходя из предложения, что процесс установившийся, «климатические» – стационарные – концентрации диоксида серы в воздухе над территорией Европы для различных сезонов года. При этом использовались климатические данные, учитывались процессы адвективного переноса, вихревая турбулентная диффузия, сухое и влажное выделение. Химическая часть представлена в упрощенном виде. При создании численного алгоритма применялась конечно-разностная аппроксимация.

Загрязнение окружающей среды, а в частности воздуха, – одна из наиболее важных задач, стоящих перед человечеством сегодня. Среди основных загрязнителей атмосферы наиболее вредными являются сера и ее соединения, главным образом сернистый газ  $SO_2$ . О влиянии этого газа на качество воздуха писали еще в семнадцатом веке. Около ста лет назад о сернистом газе упоминали как о возможной причине деградации лесов в Германии. И до сих пор внимание к этому газу не ослабевает по ряду причин. Во-первых, диоксид серы, наряду с окислами азота, является причиной возникновения кислотных дождей, которые остаются проблемой регионального масштаба [7]. Во-вторых, среди исследователей облаков существует гипотеза, утверждающая, что в удаленных от промышленных зон районах основная масса ядер конденсации состоит из сернистых компонентов. Так это или нет, пока неизвестно, но без изучения соединений серы в атмосфере ответить на этот вопрос вряд ли удастся. В-третьих, продолжает оставаться спорным вопрос о связи климата с сульфатным аэрозолем. Полагают, что прямое влияние сульфатного аэрозоля заключается в отражении солнечной радиации, а косвенное – в изменении альbedo облаков и их количества. В-четвертых, некоторые авторы отмечают, что окисление диоксида серы, растворенного в каплях облаков, является существенным стоком фотооксидантов, в частности озона. Учитывая большие эмиссии  $SO_2$ , имеет смысл рассматривать этот процесс при расчетах регионального бюджета озона.

Одним из наиболее эффективных методов, позволяющих решать упомянутые задачи, является численное моделирование. Моделированием воздушного переноса загрязняющих веществ занимаются уже несколько десятков лет. В настоящее время применяются два основных типа моделей – лагранжевые и эйлеровы. В первых производится расчет диффузии, трансформации и выведения примеси вдоль траектории движения единичного объема воздуха. Траектория находится исходя из наблюдавше-

гося или прогнозируемого поля ветра. В случае эйлеровых моделей решение задачи о переносе и трансформации примеси производится на стабильной географической сетке. При этом рассматриваемый регион разбивается в виде сетки, состоящей из 2- или 3-мерных ячеек, и решение уравнения или системы уравнений, применяемых для расчетов, производится для каждой отдельной ячейки.

### Описание модели для расчета концентраций $SO_2$

В данной статье предлагается модель переноса диоксида серы над территорией Европы. Практически все созданные до сегодняшнего дня модели предназначены для расчета переноса за какой-либо определенный промежуток времени. В нашем случае предлагается получить поля концентраций на основании климатических данных. Вводится предположение, что процесс выброса примеси и ее последующего переноса и трансформации является установившимся.

Модель базируется на основе уравнения переноса (баланса) примеси. В самом общем виде оно записывается следующим образом [4]:

$$\frac{ds}{dt} + w_a \frac{\partial s}{\partial z} = k_1 \Delta s + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial s}{\partial z} + Q + R - W. \quad (1)$$

Здесь  $s$  – объемная концентрация примеси;  $w_a$  – собственная скорость примеси;  $k_1$ ,  $k_z$  – коэффициенты турбулентности при движении в горизонтальном и вертикальном направлении соответственно;  $Q$  характеризует поступление примеси;  $R$  – изменение количества примеси за счет химических превращений;  $W$  описывает процессы выведения примеси.

Под процессами выведения примеси подразумеваются прежде всего сухое выведение и влажное вымывание. Первый процесс есть не что иное, как адсорбция молекул или частиц примеси поверхностью, например почвами, водой или растительностью. Теоретические аспекты этого процесса описаны в ряде

различных публикаций, например в [5, 7, 8, 12, 14]. Процесс влажного вымывания заключается в том, что примесь растворяется в каплях воды, имеющих в атмосфере, и содержание примеси в воздухе, таким образом, понижается. Оно может быть представлено двумя путями – внутриоблачным и подоблачным вымыванием. В первом случае подразумевается, что вымываемое вещество либо участвует в образовании облачной капли, либо захватывается каплями облака, пока они еще не падают в виде дождя. Во втором случае вещество захватывается падающей каплей дождя. Математическое описание процессов выведения дано в ряде источников, например в [8, 12, 13].

Как уже говорилось выше, задача решалась в предположении, что стационарное состояние уже установилось. Таким образом, мы не учитываем локальные производные по времени.

Предлагалось для решения данной задачи применить методику, разработанную и описанную в [4, 5]. Согласно этим публикациям оценка уровня загрязнения региона осуществляется в пределах слоя перемешивания, внутри которого рассчитывалась усредненная воздушная концентрация примеси. С этой целью к уравнению (1) было применено усреднение по вертикали. Для этого уравнение (1) проинтегрировали по высоте от 0 до  $H$ , где  $H$  – высота слоя перемешивания, и для концентраций, скоростей и источников (стоков) ввели средние величины

$$\bar{s} = \frac{1}{H} \int_0^H s(z) dz, \quad \bar{u} = \frac{1}{H} \int_0^H u(z) dz, \quad \bar{v} = \frac{1}{H} \int_0^H v(z) dz. \quad (2)$$

При усреднении использовались следующие условия на верхней и нижней границах:

$$k_z \frac{\partial s}{\partial z} = 0, \quad w_a = 0, \quad w = w_H \quad \text{при } z = H;$$

$$k_z \frac{\partial s}{\partial z} - w_a s = \beta s - f_0, \quad w = 0 \quad \text{при } z = 0, \quad (3)$$

где  $f_0$  – скорость выброса примеси приземного источника;  $\beta$  – скорость поглощения примеси земной поверхностью.

При усреднении, помимо усредненной концентрации, возникнут величины  $s_0$  – концентрация у земли и  $s_H$  – концентрация на верхней границе слоя перемешивания. Их выражаем следующим образом:

$$s_0 = \bar{s} \alpha, \quad s_H = \alpha_H \bar{s},$$

$$\text{где } \alpha = \frac{s_0}{\bar{s}}, \quad \alpha_H = \frac{s_H}{\bar{s}}. \quad (4)$$

Величины  $\alpha_H, \alpha$  находятся исходя из полуэмпирических соотношений [5]. При реализации считалось, что задача стационарная, а также что  $k_x = k_y = k$ .

Имея это в виду, а также учитывая (3) и (4), получаем итоговое уравнение, используемое в модели:

$$u \frac{\partial s}{\partial x} + v \frac{\partial s}{\partial y} - k \Delta s + \sigma S = F. \quad (5)$$

Знак усреднения в (5) опущен;  $F$  обозначает источник;  $\sigma$  – параметр, учитывающий процессы выведения примеси из атмосферы: сухое поглощение, потоки через верхнюю границу, влажное выделение, химические реакции, т.е. можем записать [4]

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4. \quad (6)$$

При этом  $\sigma_1 = \alpha_0 \beta / H$  есть параметр, определяющий сухое осаждение;  $\beta$  – скорость сухого осаждения;  $\sigma_4 = \alpha_H w_a / H$  характеризует поток субстанции, имеющей собственную скорость, к поверхности. Но в нашем случае рассматриваемое вещество – газ, следовательно, его собственную скорость можно не учитывать, поэтому  $\sigma_4$  более упоминаться не будет. Параметр  $\sigma_2$  характеризует влажное вымывание примеси, а  $\sigma_3$  определяет химические трансформации.

### Математическая реализация

Данная задача решается конечно-разностным способом. Особенностью эллиптического уравнения (5) является наличие производных первого порядка.

Согласно [10] аппроксимировать производные центральными разностями нежелательно, иначе придется брать коэффициент перед вторыми производными (в нашем случае) слишком большим. Поэтому применялись направленные разности. Согласно [6, 10] использовались следующие аппроксимации производных:

$$u \frac{\partial s}{\partial x} = u^+ s_x + u^- s_x^-, \quad \text{где } u^+ = \frac{u + |u|}{2}, \quad u^- = \frac{u - |u|}{2};$$

$$s_x^+ = \frac{s_{i,j+1} - s_{i,j}}{h}, \quad s_x^- = \frac{s_{i,j} - s_{i,j-1}}{h}. \quad (7)$$

Аналогично представлялась аппроксимация для члена со скоростью  $v$ . Лапласиан расписывался достаточно обычным способом:

$$\Delta s = - \frac{4s_{i,j} - s_{i,j+1} - s_{i,j-1} - s_{i-1,j} - s_{i+1,j}}{h^2}. \quad (8)$$

Здесь  $h$  – шаг сетки.

Однако следует иметь в виду, что при использовании направленных конечных разностей возникает вычислительная вязкость, приводящая к сглаживанию полей [6].

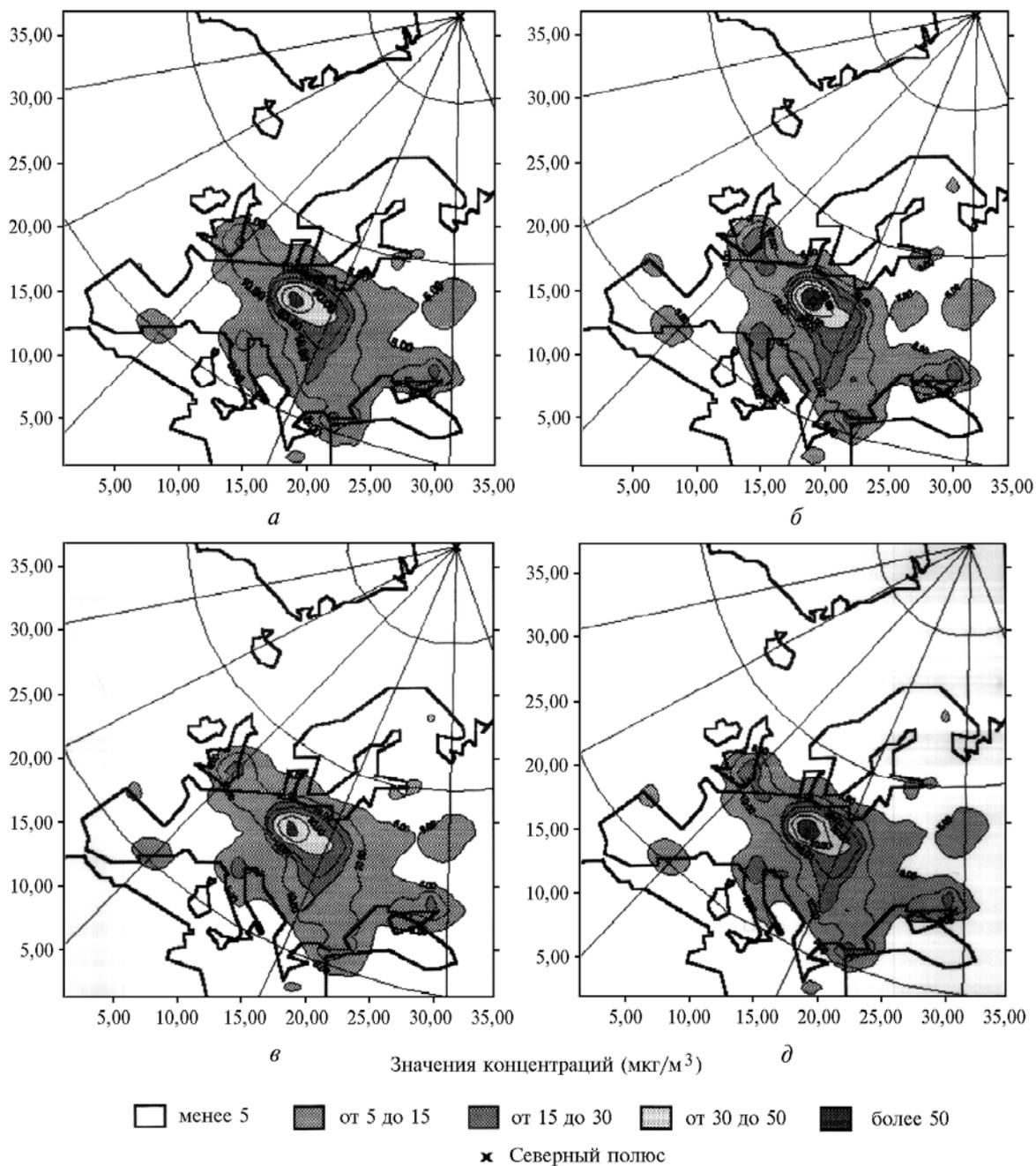
В модели граничные условия ставились следующим образом:

$$S_r = \text{const}, \quad (9)$$

где под символом «const» подразумеваются значения концентраций, полученных из наблюдений или на ос-

нове результатов какой-либо другой модели. При численных расчетах в данной модели это значение бра-лось равным нулю.

Задача решалась методом итераций.



Концентрация диоксида серы над территорией Европы для различных месяцев: *a* – январь; *б* – июль; *в* – октябрь; *г* – апрель

### Входные параметры и территория расчета

Расчет концентраций SO<sub>2</sub> производился для территории Западной Европы и европейской части бывшего СССР на сетке модели Гидрометцентра [3] с шагом 150 км. Вся область расчета покрывалась сеткой 35×37 ячеек. Для каждой ячейки рассчитывались среднегодовые выбросы диоксида се-

ры. Вычисления величин эмиссий в каждой ячейке производились методом линейной интерполяции на основе данных ЕМЕП (от латинского сокращения ЕМЕП – Cooperative Monitoring and Evaluation Programme on Transmission of Air Polutants in Europe – совместная программа наблюдения и оценки распространения загрязняющих воздух веществ на большие расстояния в Европе).

Средний в слое ветер рассчитывался согласно [5] по следующим формулам:

$$\bar{u} = c_1 \bar{u}_g + c_2 \bar{v}_g, \quad \bar{v} = c_1 \bar{v}_g + c_2 \bar{u}_g. \quad (10)$$

Здесь  $c_1 = 0,914$ , а  $c_2 = 0,096$ ; средние в слое значения геострофического ветра  $u_g, v_g$  вычислялись исходя из полей геопотенциала на изобарических поверхностях 1000 и 850 мбар методом полиномиальной интерполяции. Данные о геопотенциале брались из [1]. Так как использовались среднемесячные значения геопотенциалов, то значения ветра также являлись среднемесячными.

Средние значения высоты слоя перемешивания задавались согласно климатическим оценкам, представленным в [9], и брались одинаковыми во всех ячейках сети, хотя на самом деле значения  $H$  должны меняться в пространстве.

Параметр  $k$  – коэффициент вихревой (среднемаштабной) турбулентности. Под вихревой турбулентностью понимают обмен значительных объемов воздуха, происходящий в результате перемещения вихрей с вертикальной осью, горизонтальные параметры которых не превышают  $4Dh$  ( $Dh$  – шаг сетки). Согласно [3] этот коэффициент может быть параметризован по методу, предложенному В.А. Шнайманом:

$$k = gL_{\min}^2 |\Omega|, \quad (11)$$

где  $|\Omega|$  – модуль вихря скорости;  $L_{\min}$  – минимальная длина волны, которая описывается моделью явно ( $L_{\min} = 4Dh$ );  $g$  – коэффициент, который подбирают эмпирическим путем ( $g = 0,18$ ). Реально коэффициент вихревой турбулентности при расчетах, как правило, задается. В данной задаче была произведена его оценка, после чего он задавался изначально одинаковым для всех ячеек области расчета.

При выполнении задачи параметры сухого осаждения и влажного вымывания задавались одинаковыми по всей области расчета.

Химическая трансформация примеси задавалась достаточно простым образом. Полагалось, что часть примеси, выброшенная в атмосферу, сразу же превращается в сульфат. Эта часть составляет согласно [11] 5–15% от количества, изначально выброшенного в воздух.

Параметры, использованные в расчетах, приведены ниже.

Коэффициент турбулентности, $K$ . . . . .	$10^5 \text{ м}^2/\text{с}$
Высота слоя перемешивания, $H$ . . . . .	1000 м (январь)
. . . . .	1500 м (июль)
. . . . .	1250 м (апрель, октябрь)
Параметр $\alpha_0$ . . . . .	1,72
Скорость сухого осаждения, $\beta$ . . . . .	1,0 см/с
Коэффициент сухого осаждения, $\sigma_1$ . . . . .	$1,72 \cdot 10^{-6}$ 1/с
Коэффициент вымывания, $\sigma_2$ . . . . .	$1,0 \cdot 10^{-5}$ 1/с
Доля примеси, превращенная в сульфат . . . . .	10%

## Полученные результаты. Направления улучшения модели

При выполнении поставленной задачи был разработан численный алгоритм решения уравнения переноса примеси. На основании климатических данных были рассчитаны поля концентраций диоксида серы. Тем не менее требуется гораздо более тщательная подготовка входных данных, в частности параметров сухого и влажного выведения, метеорологической информации, химические преобразования.

В качестве результата можно представить рассчитанные поля концентраций диоксида серы над территорией Европы для различных месяцев года. Они представлены на рисунке.

Из рисунка видно, что во-первых, полученные пространственные неоднородности концентраций диоксида серы отражают распределение источников. Максимумы величин совпадают с географией крупных промышленных центров и районов, а также городов с большим населением. Довольно четко проявляются районы центральной части Германии, Донбасса, Лондон, Москва. Во-вторых, мы видим проявление влияния западного переноса.

Видно также, что значения концентраций в значительной степени схожи для всех четырех месяцев. Скорее всего, это связано с тем, что не была учтена пространственная и временная изменчивость для ряда параметров, таких как осадки и связанный с ними коэффициент влажного выведения, сухие выпадения, высота слоя перемешивания.

Таким образом, модель требует усовершенствования. Из основных путей, по которым следует проводить улучшения, можно выделить следующие.

Во-первых, учесть пространственную неоднородность и сезонную изменчивость осадков.

Во-вторых, учесть пространственные изменения коэффициента сухого выведения, так как он зависит прежде всего от типа подстилающей поверхности.

В-третьих, учесть изменчивость высоты слоя перемешивания.

В-четвертых, продумать более детальное описание процессов химической трансформации.

1. Атлас климатических характеристик, температуры, плотности, давления воздуха, скорости ветра и геопотенциала в тропосфере и нижней стратосфере Северного полушария. Вып. IV. Московское отделение Гидрометиздата. М., 1974. 93 с.
2. Белов П.Н. Перенос загрязняющих веществ и лучистой энергии в атмосфере. М.: Изд-во МГУ, 1993. 73 с.
3. Белов П.Н., Борисенко Е.П., Панин Б.Д. Численные методы прогноза погоды. Л.: Гидрометеиздат, 1986. 315 с.
4. Белов П.Н. Восстановление поля загрязнения в географических районах на основе математической модели переноса примесей // Оптика атмосферы и океана. 1995. Т. 8. № 7. С. 977–989.
5. Белов П.Н., Карлова З.Л. Оценка количества осаждающихся на земную поверхность вредных примесей методом математического моделирования // Вестник МГУ. Сер. 5. География. 1992. N 1. С. 30–36.

6. Вельтицева Н.С. Численная модель дальнего переноса двуокиси серы // Метеорология и гидрология. 1977. № 9. С. 42–49.
7. Израэль Ю.А. Кислотные дожди. Л.: Гидрометеоздат, 1991. 207 с.
8. Мониторинг трансграничного переноса загрязняющих воздух веществ / Под ред. Ю.А. Израэля, М.И. Назарова, Ш.Д. Фридмана. Л.: Гидрометеоздат, 1987. 302 с.
9. Климатические характеристики условий распространения примесей в атмосфере / Под ред. Э.Ю. Безуглой и М.Е. Берлянда. Л.: Гидрометеоздат, 1983. 328 с.
10. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 550 с.
11. Eliassen A. The OECD study of long range transport air pollutants: long range transport modelling // Atmosph. environ. 1978. V. 12. N 1–3. P. 479–487.
12. Garland L.A. Dry and wet removal of sulfur from the atmosphere // Atmosph. environ. 1984. V. 18. N 5. P. 349–362.
13. Hales J.M. Wet removal of sulfur compounds from the atmosphere // Atmosph. environ. 1984. V. 18. N 5. P. 389–399.
14. Platt U. Dry deposition of SO<sub>2</sub> // Atmosph. environ. 1984. V. 18. N 5. P. 363–367.

Московский государственный университет  
им. М.В. Ломоносова

Поступила в редакцию  
28 апреля 1998 г.

*P.N. Belov, I.S. Il'in.* **Reconstruction and Numerical Analysis of Pollutant Concentration Fields in Geographical Regions.**

A stationary vertically averaged Eulerian model of sulfur dioxide transport over Europe is presented. The model is based on numerical solution of admixture transport (balance) equation. The goal of the work is to get «climatic» – stationary sulfur dioxide concentrations in air for certain territory, assuming the stationarity of the process. Consequently, the climatic data can be used to solve this problem.

When solving this problem, the processes of advective transport, vortex turbulent diffusion, dry and wet deposition were taken into consideration. The chemistry is presented in simplified form. When treating the numerical algorithm, the finite difference approximation was applied.