

# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ВТОРИЧНЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ВОЗДУХА ВБЛИЗИ ИНДУСТРИАЛЬНОГО ЦЕНТРА\*

Д. А. БЕЛИКОВ

*Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск, Россия*

e-mail: belikov@iao.ru

А. В. СТАРЧЕНКО

*Томский государственный университет, Россия*

e-mail: starch@math.tsu.ru

A model of the pollution transport with the added scheme capable to account for the formation of the secondary pollutants is proposed. Eulerian model of the turbulent diffusion is used. It includes the transport equation describing advection, turbulent diffusion and chemical reaction. A short-term forecast of the urban weather is realized using one-dimensional unsteady model of atmospheric boundary layer.

## Введение

Одной из актуальных проблем охраны окружающей среды является мониторинг и прогноз экологического состояния пограничного слоя атмосферы. В настоящее время эта проблема успешно решается с использованием методов математического моделирования. Круг задач, для которого проектируются и разрабатываются математические модели, постоянно расширяется и включает: выявление характерных особенностей распространения загрязнений над выбранной территорией при различных погодных условиях [1], изучение вклада отдельных источников в общий баланс загрязнения атмосферы [2], оценку последствий возможных аварийных ситуаций на объектах повышенной опасности [3] и др. Достоверность оценки загрязненности воздуха существенно повышается при учете химических и фотохимических реакций, протекающих в атмосфере между продуктами антропогенных выбросов и компонентами воздуха [4]. Такой подход позволяет рассчитывать концентрации вновь образующихся вторичных загрязнений, многие из которых весьма опасны (озон, перацетилнитраты), и получать с достаточно высоким разрешением распределения концентраций компонентов примеси над районами города и пригородом, не прибегая к более затратным инструментальным методам исследования.

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-07-90219).

© Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 2005.

# 1. Численная модель переноса примеси с учетом химических реакций

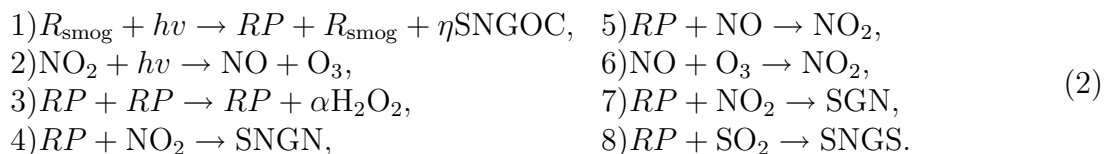
В данной работе для расчета концентрации компонентов примеси с учетом химических взаимодействий между ними применяется эйлерова модель турбулентной диффузии, которая включает транспортные уравнения с описанием адвекции, турбулентной диффузии и химических реакций [5]:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + U \frac{\partial C_i}{\partial x} + V \frac{\partial C_i}{\partial y} + W \frac{\partial C_i}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial x} \langle c_i u \rangle - \frac{\partial}{\partial y} \langle c_i v \rangle - \frac{\partial}{\partial z} \langle c_i w \rangle + S_i + R_i, i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

Здесь  $C_i(t, x, y, z)$  — концентрация  $i$ -го компонента примеси;  $S_i$  — источниковый член, представляющий выбросы компонентов примеси в атмосферу и их осаждение на подстилающую поверхность;  $R_i$  описывает образование вещества за счет химических реакций с участием компонентов примеси;  $t$  — время;  $x, y, z$  — пространственные координаты. Прописными символами обозначены осредненные составляющие, строчными — пульсационные; угловые скобки означают осреднение Рейнольдса по времени.

Метод расчета компонент осредненной скорости ветра  $U, V, W$  и турбулентных корреляций концентрации с компонентами пульсаций скорости ветра  $\langle c_i u \rangle, \langle c_i v \rangle, \langle c_i w \rangle$ , входящих в уравнения (1), а также применяемые для этого модели атмосферного пограничного слоя и турбулентности подробно описаны в [6].

Моделирование газофазной фотохимии осуществляется на основе полуэмпирической кинетической схемы Аззи, используемой в модели Харли [4], которая опирается на полуэмпирический механизм GRS (Generic Reaction Set), содержащий 11 химических компонентов, участвующих в восьми химических реакциях:



Здесь  $R_{\text{smog}}$  — реагирующая часть смога;  $RP$  — органические радикалы;  $\text{H}_2\text{O}_2$  — пероксид водорода;  $\text{NO}$  — оксид азота;  $\text{NO}_2$  — диоксид азота;  $\text{O}_3$  — озон;  $\text{SO}_2$  — диоксид серы;  $\text{SNGOC}$  — устойчивые негазообразные органические соединения углерода;  $\text{SGN}$  — устойчивые газообразные соединения азота;  $\text{SNGN}$  — устойчивые негазообразные соединения азота;  $\text{SNGS}$  — устойчивые негазообразные соединения серы.

Кроме того, в модель было добавлено еще одно соединение — оксид углерода, которое в рассматриваемой кинетической схеме принимается химически инертным и может использоваться как критерий оценки адекватности представления численной моделью переноса примеси за счет адвекции и турбулентной диффузии. Таким образом, в рассматриваемой задаче требуется решить 9 уравнений вида (1).

В качестве граничных условий для концентраций на верхней границе ставятся простые градиентные условия, на нижней границе используются граничные условия, моделирующие сухое осаждение компонентов примеси [7], на входных боковых границах используются фоновые значения, определяемые на каждом шаге по времени предварительным расчетом при помощи боксовой модели. Начальные значения для озона, оксида углерода, оксида и диоксида азота выбирались по данным измерений ТОР-станции Института оптики атмосферы СО РАН (ИОА СО РАН). Фоновое значение для углеводородов принималось

равным  $0.2 \text{ млрд}^{-1}$  [4]. Для остальных компонентов задавались нулевые начальные фоновые значения вследствие отсутствия каких-либо данных наблюдений. При инициализации модели принималось, что во всей расчетной области концентрации рассматриваемых компонентов примеси равны начальным фоновым.

Пространственные нестационарные уравнения (1) решались численно для параллелепипеда с многочисленными поверхностными и высотными источниками примеси. Необходимые для расчета переноса примеси поля температуры, влажности, скорости и направления ветра рассчитывались по модели атмосферного пограничного слоя [6]. Аппроксимация дифференциальных операторов в (1) осуществлена со вторым порядком по координатам и первым по времени с использованием явных разностных схем для всех членов уравнения, за исключением вертикальной диффузии и химических реакций. Такой способ дискретизации дифференциальной задачи позволяет решить проблемы, возникающие из-за нелинейности уравнений (1), и существенно ускорить получение результата вследствие применения экономичного метода прогонки при приемлемом ограничении на величину шага по времени. Адвективные члены уравнений переноса (1) аппроксимируются с использованием монотонизированной противопотоковой схемы Ван Лира.

Учет в модели протекания химических реакций, приводящих к появлению вторичных загрязнителей воздушного бассейна, требует значительных вычислительных затрат, поэтому при расчетах использовались высокопроизводительные вычислительные ресурсы — многопроцессорные кластерные системы ИОА СО РАН (<http://cluster.iao.ru>) и Томского государственного университета (<http://cluster.tsu.ru>), на которых установлен интерфейс передачи сообщений MPI (Message Passing Interface).

Распараллеливание численного метода решения уравнений (1) производилось с использованием геометрического принципа — декомпозиции по данным. Вся область исследования разделялась на одинаковые подобласти. В данной работе параллелепипед области исследования ( $-L_x/2 \leq x \leq L_x/2$ ,  $-L_y/2 \leq y \leq L_y/2$ ,  $0 \leq z \leq L_z$ ) разрезался сечениями  $y = \text{const}$  с распределением данных каждой подобласти соответствующему процессорному элементу. Все сеточные значения концентрации  $(C_i)_{k,l,m}^{t+1}$  равномерно распределялись по вычислительным узлам многопроцессорной системы с распределенной памятью. Внутри каждой подобласти сеточные уравнения, полученные в результате принятого подхода дискретизации уравнений (1), решались одновременно методом прогонки. Однако из-за выбранного разностного шаблона при расчете значений концентраций вдоль приграничной сеточной линии необходимы сеточные значения концентраций из соседней подобласти. Межпроцессорные обмены приграничных сеточных значений были организованы с использованием функций библиотеки передачи сообщений MPI\_SendRecv.

## 2. Результаты расчетов

Представленная модель переноса и химической трансформации примеси применялась для анализа загрязнения атмосферы города Томска продуктами вторичной эмиссии. Основное внимание уделялось исследованию образования приземного озона. Для оценки достоверности результатов расчета использовались данные наблюдений, полученные на ТОР-станции ИОА СО РАН.

В расчетной области, которая представляет собой параллелепипед высотой 2 км с горизонтальными размерами  $30 \times 30$  км, в центре которого располагается город Томск, строится сетка  $100 \times 100 \times 100$  узлов, равномерная по горизонтали и неоднородная, сгущающаяся к

поверхности в вертикальном направлении. В расчетах рассматривается 119 линейных, 12 площадных и 338 точечных источников. Учитывается изменение интенсивности поступления примеси от автомобилей в течение суток [8]. Предполагается, что в совокупном объеме оксидов азота, поступающих в атмосферу с автомобильными выхлопами, содержится 75 % оксида азота и 25 % диоксида [8].

На рис. 1 представлены результаты расчетов и данные наблюдений для условий 26–27 мая 2004 года, полученные в области расположения ТОР-станции ИОА СО РАН. Расчетные профили показывают, что приземная концентрация озона начинает расти после восхода солнца и достигает своего максимума после полудня, когда пик солнечной активности уже миновал. Это обусловлено тем, что в дневное время значительной становится фотохимическая реакция фотоллиза диоксида азота с образованием озона и оксида

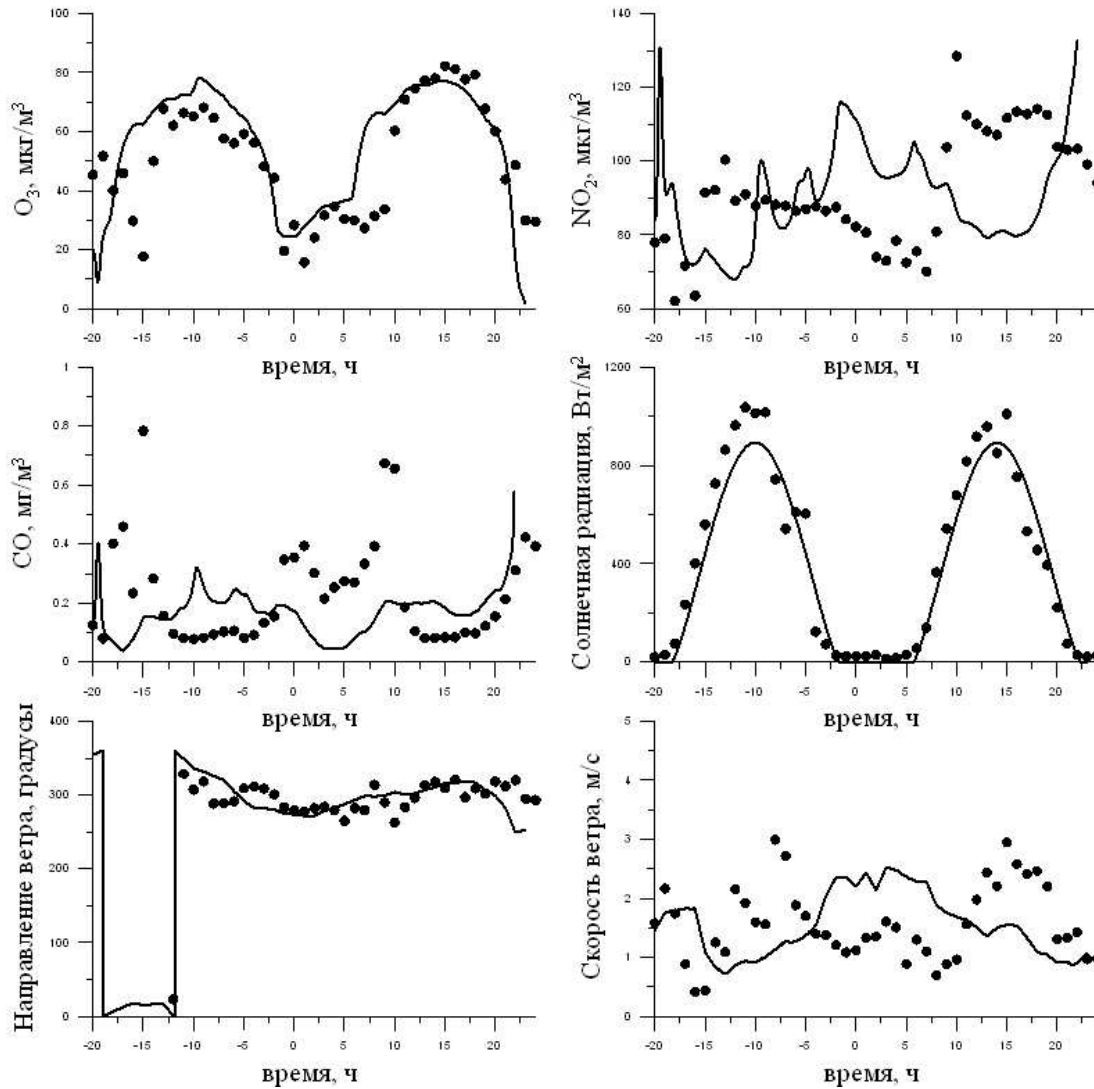


Рис. 1. Результаты расчетов (кривая) и данные наблюдений на ТОР-станции ИОА СО РАН (символы) по концентрациям озона, диоксида азота и оксида углерода, суммарной солнечной радиации, направлению и скорости ветра для условий 26–27 мая 2004 года. Отрицательная часть временной оси соответствует первым суткам моделирования, положительная — вторым. В расчетах использованы начальные фоновые значения: для озона — 49 мкг/м<sup>3</sup>, диоксида азота — 93.5 мкг/м<sup>3</sup>, оксида углерода — 0.1 мг/м<sup>3</sup>.

азота (см. кинетическую схему (2)), скорость которой превосходит скорость обратной реакции (6). Такая ситуация приводит к снижению концентрации диоксида азота в дневное время, поскольку уровень его эмиссии невысок и неспособен компенсировать потери (рис. 1). Согласно реакции (2) образование озона сопровождается генерацией оксида азота, максимальные концентрации которого также фиксируются в полдень и через реакцию (6) ограничивают рост концентрации озона. Однако если попутно выбрасываются или образуются по реакции (1) органические радикалы, то посредством достаточно быстрой реакции (5) обеспечивается дополнительный механизм образования диоксида азота, а следовательно, увеличивается выход озона по реакции (2). В ночное время фотохимические реакции отсутствуют, поэтому существенное значение приобретает реакция (6) взаимодействия оксида азота и озона с образованием диоксида азота, что обеспечивает накопление последнего в приземном слое.

Таким образом, профили приземной концентрации оксида азота и озона в течение суток подобны и зависят от уровня солнечной радиации, а для диоксида азота, наоборот, характерны дневные минимумы и ночные максимумы концентрации.

Явная зависимость от уровня солнечной радиации прослеживается и для других вторичных загрязнителей (углеводородных соединений и радикалов), что обусловлено фотохимической реакцией их образования.

Характерные ночные максимумы и дневные минимумы концентрации оксида углерода (рис. 1), по всей видимости, обусловлены фактором запирающей инверсии. Радиационное выхолаживание поверхности в ночные часы снижает турбулентное перемешивание в приземном слое и, соответственно, вынос примеси в верхние слои атмосферного пограничного слоя, что способствует при близких к штилевым условиям ее накоплению вблизи поверхности. Утреннее разрушение инверсии за счет солнечной радиации и прогрева земной поверхности, наоборот, интенсифицирует обменные процессы между нижними и верхними слоями, а следовательно, способствует рассеянию примеси. По нашему мнению, этот же механизм должен касаться и других примесей, в том числе и диоксида азота, что подтверждается результатами расчетов (рис. 1). Отметим, что рассматриваемая модель четко реагирует на падение скорости ветра повышением концентрации оксида углерода и других примесей в приземном слое воздуха.

Таким образом, соответствие расчетных профилей концентраций озона измеренным данным позволяет говорить о допустимости применения данной модели для изучения образования и рассеяния приземного озона в городе и его окрестностях. Удовлетворительное согласование результатов расчета и наблюдений приземной концентрации оксида углерода указывает на адекватность представления адвективно-диффузионных процессов в используемой численной модели переноса примеси.

Рассматриваемая модель переноса примеси с учетом химических превращений была применена для изучения суточной динамики распределения приземной концентрации озона, диоксида азота и других соединений.

Высокие концентрации диоксида азота формируются непосредственно над городскими кварталами вследствие прямой эмиссии от источников и посредством окисления оксида азота (рис. 2, *a*), а затем сносятся ветром за город. Таким образом, с подветренной стороны города образуется протяженный шлейф повышенной концентрации диоксида азота, разлагающегося под действием солнечного света с образованием озона (рис. 2, *b*), что подтверждается работой [8].

В дневные часы (рис. 2, *b*), когда солнечная радиация наиболее интенсивна, минимальные значения приземной концентрации озона наблюдаются в черте города, особенно в

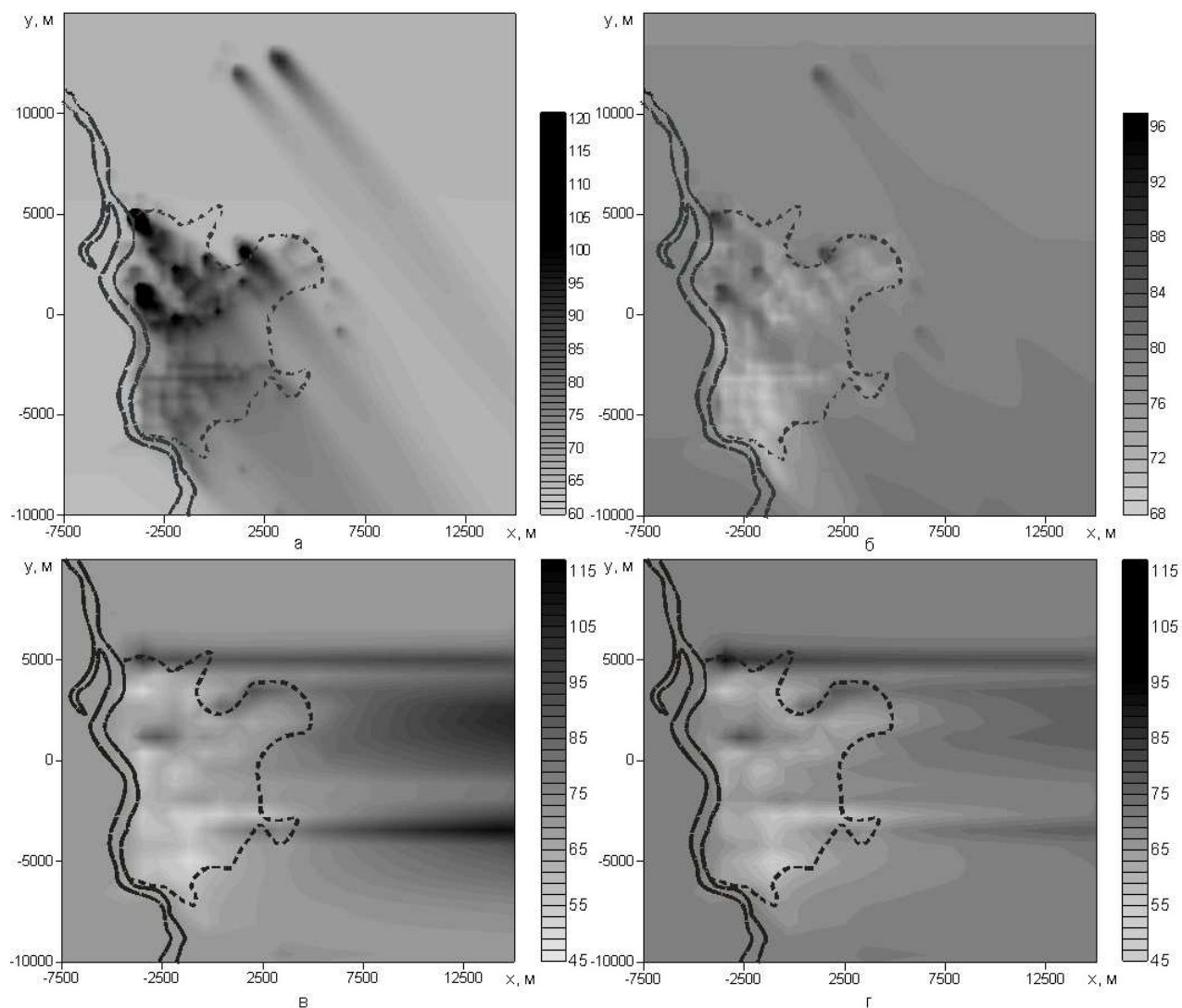


Рис. 2. Распределение концентрации диоксида азота (*а*) и озона (*б*) ( $\text{мкг}/\text{м}^3$ ) в расчетной области на 16:00 27 мая 2004 года, а также распределение концентрации озона ( $\text{мкг}/\text{м}^3$ ) при скорости ветра 1 м/с (*в*) и 2 м/с (*г*) и постоянном направлении на 16:00 при реальных условиях 11 июня 2004 года. На графиках сплошной линией выделено русло реки Томь, пунктиром очерчена граница города.

окрестностях автодорог с наиболее интенсивным движением, вследствие высокого уровня оксида азота, выбрасываемого автотранспортом и промышленными предприятиями. Ветер в данный момент времени имеет северо-западное направление, поэтому область наибольших концентраций озона расположена у юго-восточной окраины города, что обусловлено выносом примеси из города и созданием тем самым благоприятных условий для генерации озона за счет фотолиза диоксида азота. На рис. 2, *б* отчетливо видны области максимальных концентраций озона, образующиеся в окрестностях промышленных предприятий, в выбросах которых содержатся оксиды азота и углеводородные соединения, что, как показано выше, обеспечивает в дневное время высокую скорость генерации озона через реакции (1), (5), (2).

В данной работе также исследуется влияние скорости ветра на загрязнение приземного атмосферного воздуха города озоном. Для этого рассматривались случаи скорости

ветра 1 и 2 м/с при постоянном западном направлении. Распределение других метеорологических параметров и суточное изменение солнечной активности соответствуют реальным условиям для 11 июня 2004 года. Выявлено, что при скорости 1 м/с (рис. 2, в) максимальные концентрации озона образуются непосредственно за городом с подветренной стороны, охватывая и городские окраины. При увеличении скорости до 2 м/с (рис. 2, г) области максимальных значений концентрации приземного озона отодвигаются от городской окраины и формируются на некотором расстоянии от города, которое будет расти с увеличением скорости ветра.

Таким образом, условия, близкие к штилевым, будут способствовать установлению опасных концентраций озона в черте города, а скорости ветра, обычно формирующиеся в приземном слое (2...6 м/с), обеспечивают перенос вторичных загрязнителей в пригород [8].

На основе выбранной модели выявлены особенности загрязнения атмосферы города озоном и его предшественниками, исследовано пространственное распределение приземной концентрации озона. Для решения задачи построен эффективный параллельный алгоритм. Разработанная модель может быть использована для оперативного прогноза качества городского воздуха, поскольку ее применение обеспечивает высокую скорость получения результатов с хорошей точностью предсказания.

## Список литературы

- [1] MOUSSIOPOULOS N., SAHM P., KESSLER C. Numerical simulation of photochemical smog formation in Athens, Greece — A case study // Atmospheric Environment. 1995. Vol. 29, N 24. P. 3619–3632.
- [2] СТАРЧЕНКО А.В., БЕЛИКОВ Д.А., ЕСАУЛОВ А.О. Численное моделирование влияния метеорологических параметров на качество атмосферного воздуха в городе // Тр. конф. ENVIRONMENTIS 2002. Томск: Изд-во ГУ “Томский ЦНТИ”, 2002. С. 142–151.
- [3] ПЕНЕНКО В.В., КОРОТКОВ М.Г. Применение численных моделей для прогнозирования аварийных и экологических ситуаций в атмосфере // Оптика атмосферы и океана. 1998. Т. 11, № 6. С. 567–572.
- [4] HURLEY P.J. The Air Pollution Model (TAPM) Version 1: Technical Description and Examples. CSIRO Atmospheric Research Technical Paper N 43. Aspendale: CSIRO, 1999. 39 p.
- [5] БЕРЛЯНД М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1975. 448 с.
- [6] СТАРЧЕНКО А.В., БЕЛИКОВ Д.А. Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха // Оптика атмосферы и океана. 2003. № 7. С. 657–665.
- [7] PEREGO S. Metphomod — a numerical mesoscale model for simulation of regional photosmog in complex terrain: model description and application during pollumet 1993 (Switzerland) // Meteorology and Atmospheric Phys. 1999. Vol. 70, N 1–2. P. 43–69.
- [8] TULET P., MAALEY A., CRASSIER V., ROSSET R. An episode of photooxidant plume pollution over the Paris region // Atmospheric Environment. 1999. Vol. 33, N 11. P. 1651–1662.