

МОДЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ АЭРОЗОЛЬНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ОТ НАЗЕМНОГО ПЛОЩАДНОГО ИСТОЧНИКА

Т.В. Ярославцева, В.Ф. Рапута

На основе полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии в приземном слое атмосферы разработаны модели оценивания полей массовой и счётной концентраций аэрозольных примесей в окрестности площадного источника. С использованием предложенных моделей проводится численная интерпретация результатов экспедиционных исследований состава приземного аэрозоля на примере оз. Селитренное Алтайского края.

В традиционных задачах переноса и диффузии аэрозольных примесей в атмосфере режим функционирования источников предполагается заданным [1, 2]. Ситуация существенно меняется в случае, когда источником примеси является подстилающая поверхность. Тогда ветровой подхват примеси и её дальнейший перенос будет в значительной степени зависеть от состояния этой поверхности (влажности, гранулометрического состава, прочности сорбции примеси на подстилающей поверхности и т.д.). Решение задачи ветровой миграции в общей постановке представляет значительные затруднения. Определённый прогресс имеется в описании процессов переноса песка при пыльных бурях [3, 4], однако остаётся открытым вопрос об определении количества поднятой пыли. На практике эта неопределённость обычно решается эмпирически, путём введения коэффициента ветрового подхвата, характеризующего отношение концентрации примеси в воздухе к поверхностной концентрации на почве [5].

В работе [6] предложена модель долгопериодного переноса примеси в атмосфере вследствие ветрового подхвата. Методом сингулярных возмущений оценены пределы применимости модели. Обсуждается проблема её информационной обеспеченности. В статье [7] с использованием данных натурных наблюдений показано существование достаточно простых закономерностей распределения массовой концентрации аэрозольной примеси в окрестностях хвостохранилищ. В настоящей работе для интерпретации данных наблюдений переноса аэрозолей в атмосфере от площадных источников применён метод постановок обратных задач. Такой подход даёт возможность использовать разнообразные экспериментальные данные и априорную информацию для восстановления полей аэрозольного загрязнения территорий и уточ-

нения параметров моделей переноса атмосферных примесей.

1. Экспедиционные исследования

Селитренное озеро расположено в западной части Алтайского края и представляет собой открытое хранилище кристаллического сульфата натрия площадью около 6 км². При определённых метеорологических условиях и технологических процессах возможен вынос значительной части сульфатных частиц размером 0,05–10 мкм в пограничный слой атмосферы, что даёт заметный вклад в региональный аэрозольный фон.

Положение озера и схема пробоотбора представлены на рис.1. В таблице 1 приведены результаты полевых измерений счётной концентрации аэрозоля в приземном слое атмосферы в экспедициях 1997 и 2004 гг.

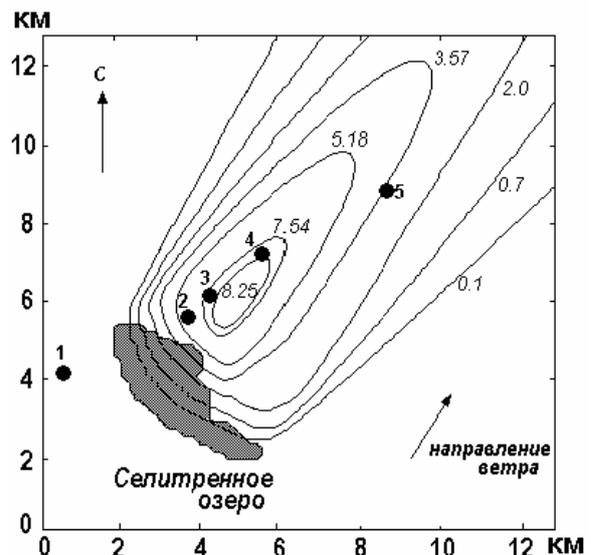


Рис. 1. Схема отбора проб воздуха. Восстановленное поле счётной концентрации фракции 0.3-0.4 мкм сульфатного аэрозоля в окрестностях Селитренного озера, образованное при ЮЗ направлении ветра

Таблица 1
Измеренные значения счетной
концентрации (в тыс. частиц /л)

Пункт пробо- отбора	1	2	3	4	5
Расстояние от озера, км	-	0,5	1,2	3	6
0,3-0,4 мкм	$\frac{1,16}{2,59}$	$\frac{5,25}{3,24}$	$\frac{7,89}{4,45}$	$\frac{8,25}{3,44}$	$\frac{3,88}{1,56}$
0,4-0,5 мкм	$\frac{1,16}{1,75}$	$\frac{6,32}{3,71}$	$\frac{6,3}{4,42}$	$\frac{7,05}{2,67}$	$\frac{4,29}{1,09}$
0,5-1 мкм	$\frac{0,74}{0,59}$	$\frac{3,35}{2,16}$	$\frac{2,47}{1,39}$	$\frac{1,99}{1,11}$	$\frac{1,59}{0,75}$
1-2 мкм	$\frac{0,04}{0,05}$	$\frac{0,67}{0,22}$	$\frac{0,37}{0,21}$	$\frac{0,06}{0,14}$	$\frac{0,02}{0,13}$
2-5 мкм	$\frac{0,02}{0,02}$	$\frac{0,21}{0,15}$	$\frac{0,14}{0,77}$	$\frac{0,02}{0,02}$	$\frac{0,01}{0,01}$

Примечание. В числителе измерения 1997 г.,
в знаменателе – 2004 г.

Отбор аэрозольных проб производился на высоте 2 метра над поверхностью земли при юго-западном ветре. Средняя скорость ветра при отборе проб в 1997 г. составляла 6-8 м/с. При экспедиционных исследованиях в 2004 г. скорость ветра была несколько ниже и колебалась в пределах от 4 до 6 м/с. Результаты экспедиционных исследований показали, что генерация сульфатного аэрозоля с поверхности озера происходит с помощью двух механизмов: сальтации и возникновения спиральных вихрей. Для определения фона точка 1 располагалась с наветренной стороны относительно озера. Наблюдения в остальных точках проводились с подветренной стороны по маршруту, практически совпадающему с направлением ветра.

2. Постановки обратных задач

а) Приближение линейного источника.

Анализ имеющихся экспериментальных данных о концентрации аэрозолей в воздухе, системе наблюдений, пространственно-временной структуре рассматриваемых источников, метеорологических условиях показывает, что интерпретацию протекающих процессов загрязнения атмосферы предпочтительно провести в рамках постановок обратных задач переноса примеси [8, 9]. При этом следует учитывать наличие маршрутных

наблюдений, удобную поверхностную ориентацию источников пыли по отношению к господствующим для данной местности направлениям ветра.

Данная информация позволяет использовать для описания процессов переноса пыли от площадного источника суперпозицию полей концентрации от набора линейных источников, расположенных в поперечном к ветру направлении. Тогда концентрацию $q_{\pi}(r)$ на расстоянии r от площадного источника можно вычислить по формуле

$$q_{\pi}(r) = \int_0^L q_l(r + L - \eta) d\eta, \quad (1)$$

где r ориентировано по направлению ветра; L – эффективная ширина площадного источника в направлении ветра; $q_l(x)$ – концентрация от линейного источника.

Концентрацию примеси в воздухе от линейного источника опишем с помощью полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии [2]

$$u(z) \frac{\partial q_l}{\partial x} - w \frac{\partial q_l}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} m(z) \frac{\partial q_l}{\partial z}, \quad (2)$$

с граничными и начальными условиями:

$$\begin{aligned} m(z) \cdot \frac{\partial q_l}{\partial z} \Big|_{z=0, z=h} &= 0, \\ u(z) \cdot q_l \Big|_{x=x_l} &= M \cdot \delta(z - H), \end{aligned} \quad (3)$$

где z – вертикальная координата, w – скорость оседания аэрозольных частиц, H – эффективная высота источника, $u(z)$ – скорость ветра, $m(z)$ – коэффициент вертикального турбулентного обмена, M – мощность источника.

Заметные преимущества при решении обратных задач распространения аэрозоля можно получить с использованием аналитических решений уравнения (2) для легкой и оседающей примеси, аппроксимируя функции $u(z)$ и $m(z)$ степенными зависимостями вида [1, 2]:

МОДЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ АЭРОЗОЛЬНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ОТ НАЗЕМНОГО ПЛОЩАДНОГО ИСТОЧНИКА

$$u(z) = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \quad m(z) = \frac{k_1 z}{z_1}.$$

Здесь u_1 и k_1 – значения скорости ветра и коэффициента вертикального турбулентного обмена на высоте $z = z_1$.

В приближении оседающей примеси аналитическое решение $q_l(x)$ имеет следующий вид [2]:

$$q_l(x) = \frac{M}{k_1(1+n)x^\omega} \exp\left(-\frac{r_m}{x}\right), \quad (4)$$

где

$$r_m = \frac{u_1 H^{1+n}}{(1+n)^2 k_1}; \quad \omega = 1 + \frac{w}{k_1(1+n)}.$$

Подставляя выражение (4) в (1) и используя теорему о среднем из интегрального исчисления, получаем

$$q_\pi(r) = \frac{M \cdot L \cdot \exp\left(\frac{-r_m}{r+L-\lambda}\right)}{k_1(1+n)(r+L-\lambda)^\omega}, \quad (5)$$

где $\lambda \in [0, L]$.

Проводя в (5) процедуру агрегирования параметров, приходим к выражению

$$q_\pi(r, \vec{\beta}) = \frac{\beta_1}{(r + \beta_2)^{\beta_3}} \exp\left(\frac{-\beta_4}{r + \beta_2}\right). \quad (6)$$

Здесь

$$\vec{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4), \quad \beta_1 = \frac{M \cdot L}{k_1(1+n)},$$

$$\beta_2 = L - \lambda, \quad \beta_3 = \omega, \quad \beta_4 = r_m.$$

В общем случае оценивание вектора параметров $\vec{\beta}$ можно провести по методу наименьших квадратов с использованием процедур последовательного анализа и планирования эксперимента [9, 10]. При определенных предположениях выражение (6) можно упростить. В частности, для лёгких фракций пыли при малой высоте подъёма и сравнительно больших r и β_2 получим

$$q_\pi(r, \beta_1, \beta_2) = \frac{\beta_1}{(r + \beta_2)}.$$

На больших расстояниях от площадного источника зависимость от β_2 становится слабой. В результате будем иметь

$$q_\pi(r, \beta_1) = \frac{\beta_1}{r}. \quad (7)$$

б) Аппроксимация точечными источниками. Предположим, что площадь рассматриваемого источника аппроксимируется покрытием из N одинаковых квадратов, соответствующим действием совокупности точечных источников одинаковой мощности. Пусть ось x совпадает с направлением ветра, ось y расположена в поперечном направлении. Тогда в силу принципа суперпозиции концентрацию аэрозольной примеси, создаваемую площадным источником, можно вычислить по формуле [2]:

$$\Psi(x, y) = M \cdot \sum_{i=1}^N \frac{\exp\left(\frac{-(y-y_i)^2}{2\varphi^2(x-x_i)^2}\right)}{\sqrt{2\pi} \varphi(x-x_i)} q_i, \quad (8)$$

где $q_i = q(x-x_i)$ – приземная концентрация аэрозоля, создаваемая линейным источником, расположенным на линии $x = x_i$, M – эмиссия примеси с единицы площади, φ – дисперсия направления ветра за время наблюдений.

В случае слабооседающей примеси ($w \approx 0$) соответствующее аналитическое решение задачи (2),(3) имеет вид

$$q(x-x_i, z)|_{z=0} = \frac{M \cdot e^{-\frac{u_1 H^{1+n}}{(1+n)^2 k_1(x-x_i)}}}{(1+n) k_1(x-x_i)}. \quad (9)$$

Тогда с учётом (8), (9) приземная концентрация слабооседающей примеси, создаваемая площадным источником опишется формулой:

$$\Psi(x, y, \vec{\theta}) = \theta_1 \cdot \sum_{i=1}^N e^{-\frac{\theta_2}{x-x_i} - \frac{\theta_3(y-y_i)^2}{(x-x_i)^2}} \frac{1}{(x-x_i)^2} \equiv \theta_1 \cdot Q(x, y, \theta_2, \theta_3), \quad (10)$$

где

$$\theta_1 = \frac{M}{(1+n)k_1\varphi\sqrt{2\pi}},$$

$$\theta_2 = \frac{u_1 H^{1+n}}{(1+n)^2 k_1}, \quad \theta_3 = \frac{1}{2\varphi^2}. \quad (11)$$

Введение вектора агрегированных параметров $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ существенно уменьшает число неизвестных коэффициентов, что значительно упрощает задачу оценивания. Оценки вектора параметров $\vec{\theta}$ можно получить с помощью метода наименьших квадратов, используя не менее трёх точек наблюдения. В данном случае метод наименьших квадратов заключается в нахождении значений параметров, доставляющих на множестве допустимых значений Ω минимум функционалу

$$J(\vec{\theta}) = \sum_{k=1}^K [\Psi(x_k, y_k, \vec{\theta}) - r_k]^2 \rightarrow \min_{\vec{\theta} \in \Omega}, \quad (12)$$

r_k – измеренное значение концентрации приреси в k -той точке наблюдений.

С учётом того, что θ_1 входит в $J(\vec{\theta})$ линейно, функционал (12) запишется в виде

$$J(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \sum_{k=1}^K [\theta_1 \cdot Q(x_k, y_k, \theta_2, \theta_3) - r_k]^2 \rightarrow \min_{\theta_1, \theta_2, \theta_3 \in \Omega}. \quad (13)$$

Из необходимого условия минимума функционала (13) на множестве Ω вытекает соотношение

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_1} = 2 \sum_{k=1}^K [\theta_1 \cdot Q(x_k, y_k, \theta_2, \theta_3) - r_k] \times Q(x_k, y_k, \theta_2, \theta_3) = 0. \quad (14)$$

Тогда из уравнения (14) получим:

$$\theta_1 = \frac{\sum_{k=1}^K r_k Q(x_k, y_k, \theta_2, \theta_3)}{\sum_{k=1}^K Q^2(x_k, y_k, \theta_2, \theta_3)}. \quad (15)$$

Подставляя (15) в исходный целевой функционал (13) приходим к вспомогательной задаче поиска минимума функции двух переменных θ_2 и θ_3 , решение которой можно получить, используя стандартные методы не-

линейного программирования, например, метод покоординатного спуска [11].

3. Численное моделирование

а). Проведём численный анализ данных наблюдений массовой концентрации с использованием модели (7). Для оценки параметра β_1 достаточно использовать одну опорную точку наблюдения. На рис. 2 приведены результаты восстановления приземной концентрации пыли в направлении маршрута пробоотбора. В качестве опорной точки взята точка № 2, которая в данном случае является наиболее информативной [10]. Сопоставление расчётов с наблюдениями в контрольных точках № 3-5 показывает достаточно высокий уровень соответствия. Весьма показательным моментом является возможность использования зависимости (7) для интерпретации данных наблюдений, проведённых как в 1997 г., так и в 2004 г. Это указывает на определённую универсальность использованного описания.

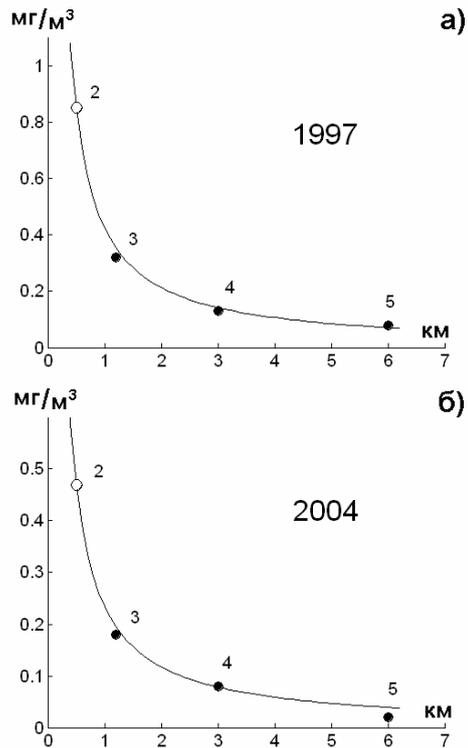


Рис. 2. Измеренные и рассчитанные значения массовой концентрации сульфатного аэрозоля. На горизонтальной оси указано расстояние от озера по маршруту наблюдений:
 — — расчётная кривая,
 ○ — измерения в опорной точке,
 ● — измерения в контрольных точках

МОДЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ АЭРОЗОЛЬНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ОТ НАЗЕМНОГО ПЛОЩАДНОГО ИСТОЧНИКА

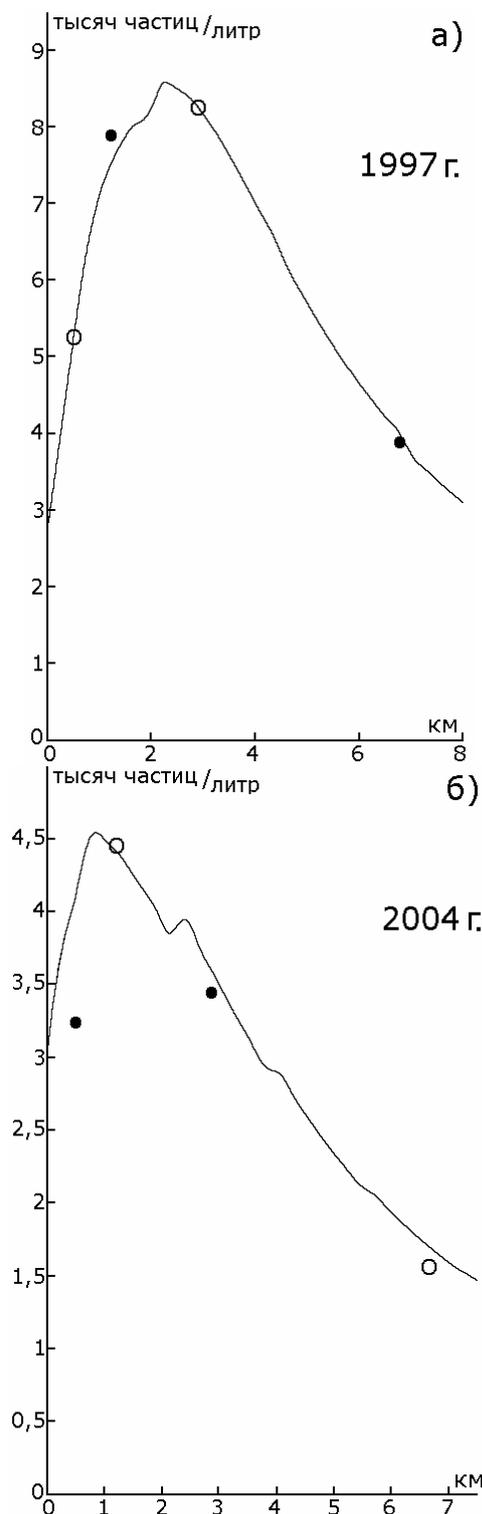


Рис. 3. Измеренные и рассчитанные значения счётной концентрации аэрозоля для фракции 0,3-0,4 мкм:

- — расчётная кривая,
- — измерения в опорных точках,
- — измерения в контрольных точках

б). С использованием предложенной модели (10) по ограниченному числу точек наблюдений было проведено численное восстановление полей счётных концентраций различных фракций аэрозольных примесей в окрестности озера. Выбор опорных точек осуществлялся с использованием методов теории оптимального эксперимента [10].

Для данного размещения системы точек пробоотбора относительно источника достаточно ограничиться характерным значением величины θ_3 для дневных условий [1, 2], поскольку она определяется структурой поля ветра и длительностью проведения наблюдений.

Результаты моделирования и сравнения с данными наблюдений изображены на рис 1, 3.

Анализ рис. 3а, 3б показывает, что соответствие рассчитанных и измеренных значений концентраций в контрольных точках вполне удовлетворительное.

В таблице 2 приведены оценки параметров модели (10) по данным наблюдений 1997 и 2004 гг.

Таблица 2
Оценки параметров модели (10) для данных наблюдений

Размер частиц, мкм	1997 г.		2004 г.	
	θ_2 , км	$\theta_1 / 10^6$	θ_2 , км	$\theta_1 / 10^6$
0,3-0,4	2,5	4,24	1,4	1,01
0,4-0,5	2,3	3,51	1	0,81
0,5-1	1,2	0,91	0,8	0,25

Значение величины θ_2 заметно изменяется с увеличением размеров частиц, что непосредственно связано с их эффективной высотой подъёма над поверхностью озера. Это обстоятельство указывает на необходимость проведения более детальных натурных исследований распределения вертикальных профилей концентрации для различных размеров частиц и условий пыления поверхности озера.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведённый теоретический анализ процессов распространения примеси и численное исследование данных натурных наблюдений позволили выявить существование достаточно простых и устойчивых закономерностей аэрозольного загрязнения приземного слоя воздуха площадным источником. Построены количественные модели восстановления

ления полей массовой и счётной концентрации сульфатного аэрозоля, вполне адекватные данным наблюдений. Приведённые оценки показывают, что эффективные высоты подъёма частиц разных фракций существенно зависят как от их размеров, так и скорости ветра. Для близких состояний пыления поверхности озера и режима турбулентного обмена в приземном слое атмосферы полученные оценки параметров дают возможность проводить численное моделирование процессов распространения сульфатного аэрозоля в окрестностях озера при произвольном направлении ветра.

Авторы выражают благодарность д.ф. – м.н. И.А. Суторихину за предоставленную экспериментальную информацию и полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН, проект 13.6.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бызова Н.Л., Гаргер Е.К., Иванов В.Н. Экспериментальные исследования атмосферной диффузии и расчеты рассеяния примеси. – Л.: Гидрометеиздат, 1991. – 279 с.
2. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеиздат, 1975. – 448 с.
3. Баренблатт Г.И., Голицын Г.С. Локальная структура развитых пыльных бурь. – М.: Изд-во МГУ, 1973. – 44 с.
4. Бютнер Э.К. Динамика приповерхностного слоя воздуха. – Л.: Гидрометеиздат, 1978. – 159 с.
5. Трансурановые элементы в окружающей среде / Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 342 с.
6. Возженников О.И., Нестеров А.В. О переносе примеси в атмосфере при ветровом подхвате с подстилающей поверхности // Метеорология и гидрология. – 1988. – № 11. – С. 63-70.
7. Рапута В.Ф., Айриянц А.А., Бортникова С.Б., Суторихин И.А. Закономерности пылевого загрязнения окрестностей хвостохранилищ // Оптика атмосферы и океана. – 2002. – Т. 15, № 8. – С. 740-743.
8. Рапута В.Ф., Королёва Г.П., Горшков А.Г., Ходжер Т.В. Исследование процессов длительного загрязнения окрестностей Иркутска тяжелыми металлами // Оптика атмосферы и океана. – 2001. – Т. 14, № 6-7. – С. 623-626.
9. Крылова А.И., Рапута В.Ф., Суторихин И.А. Планирование и анализ подфакельных наблюдений концентрации примеси в атмосфере // Метеорология и гидрология. – 1993. – № 5. – С. 5-13.
10. Фёдоров В.В. Теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 312 с.
11. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. – М.: Наука, 1980. – 519 с.