

УДК 51.7:532.546

Математическое моделирование качества воздуха на длительный период времени

© Л.В. Клочкова¹, Ю.А. Повещенко², В.Ф. Тишкин³

Аннотация. В работе представлены результаты, полученные в ходе разработок новых исполнительных модулей для интегрированного программного комплекса TIMES и методов математического прогнозирования качества окружающей среды как системного подхода к многофакторному анализу влияния различных воздействий. Приведены примеры решения некоторых практических задач.

Ключевые слова: математическое моделирование, интегрированные программные комплексы, процессы распространения загрязнений в атмосфере.

Введение

Развитие методов математического прогнозирования качества окружающей среды является разработкой системного подхода к многофакторному анализу влияния различных воздействий, таких, как природные катаклизмы, так и антропогенные и техногенные воздействия. В научной литературе, опубликованной за последние пятьдесят лет, встречается огромное количество различных моделей, учитывающих те или иные факторы происходящих процессов [1]. Разработанный интегрированный пакет “TIMES” (транспортно-информационная модель для экологических систем) представляет собой визуально-прогностический пакет, позволяющий решать задачи о распространении загрязнений в воздушном бассейне с учетом ветрового поля и получать графические отображения процессов, как в условиях городской застройки, так и над местностью, имеющей сложный географический рельеф

1. Интегрированный пакет “TIMES”

Интегрированный пакет “TIMES” является оригинальной программной системой, как по применяемым адаптированным физико-математическим моделям, так и методам решения систем уравнений, опирающихся на специально разработанные методики численного моделирования. Базовая модель этого комплекса — оперативная конвективно-диффузионная модель или транспортная модель. При этом учитывается сухое и влажное осаждение и химические превращения веществ в зависимости от времени суток и годовых колебаний температур.

Исходными данными для математического моделирования являются данные, получаемые с метеостанций, расположенных внутри расчетной области. На метеостанциях определяются скорости анемометрического и геострофического ветра, высота верхней границы

¹ Старший научный сотрудник Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, г. Москва; klud@imamod.ru.

² Ведущий научный сотрудник Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, г. Москва; poveshchenko@keldysh.ru.

³ Заместитель директора Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, г. Москва; tishkin@imamod.ru.

слоя перемешивания, интенсивность влажного осаждения и другие физические величины. Кроме того, моделируются поле скоростей ветра и коэффициенты вертикальной и горизонтальной турбулентности.

Расчетная область имеет форму прямоугольника с характерными размерами в несколько десятков километров. Характерная высота слоя перемешивания, в пределах которого происходит интенсивный перенос загрязнений, составляет $100 \text{ м} \div 2 \text{ км}$. Прогноз концентрации загрязнений производится на основании данных эмиссии, состояния атмосферы, а также химического превращения и осаждения загрязнений в пределах каждой ячейки сетки моделируемой области. Трехмерная область разбивается на ячейки. Скорость ветра, высота верхней границы слоя перемешивания, интенсивность осаждения, класс атмосферной стабильности и другие физические величины определяются на метеостанциях.

В блоке начальных данных задаются параметры сетки, некоторые коэффициенты в исходном уравнении переноса и граничные условия. Варьируя их, можно проследить влияние вычислительных схем на корректность получаемых результатов. Там же задаются метеорологические характеристики: скорость ветра, количество метеостанций, температурные градиенты и параметры, необходимые при использовании прогностической модели поля ветра.

Уравнения физико-математической модели [2] выражают массовый баланс, где эмиссия, перенос, турбулентность, химические реакции и процесс осаждения выражены в математических терминах следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} c \tilde{\mathbf{w}} - \operatorname{div} (K \operatorname{grad} c) - \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial c}{\partial z} + rc = Q, & z > h_t(x, y) \\ c = 0, z \leq h_t(x, y). \end{cases}$$

где c — концентрация, K — коэффициент горизонтальной турбулентности, K_z — коэффициент вертикальной турбулентности, $\tilde{\mathbf{w}}$ — скорость ветра, Q — поле эмиссии, r — коэффициент, характеризующий интенсивность выбывания или образования вещества по определенному закону, $h_t(x, y)$ — кусочно-непрерывная функция, которая описывает рельеф области, причем $h_t(x, y) = h_b$, если точка $(x, y, 0)$ принадлежит основанию возвышения высотой h_b , и $h_t(x, y) = 0$, если в точке $(x, y, 0)$ возвышения нет.

Система решается методом расщепления на процессы. В данной системе выделяются следующие процессы: перенос ветром, горизонтальная турбулентность и вертикальная турбулентность.

Начальные условия имеют вид:

$$c(x, y, t)|_{t=0} = c^0(x, y).$$

Значения коэффициента горизонтальной турбулентности вычисляются по формуле

$$K = \sigma_{\ominus}^2 \cdot \max(0.5, |\tilde{\mathbf{w}}|) \cdot h,$$

где σ_{\ominus} — угол горизонтальной флуктуации направления ветра в радианах в зависимости от класса атмосферной стабильности, $\tilde{\mathbf{w}}$ — скорость ветра в м/с, H — высота слоя перемешивания в м, также зависящая от атмосферной стабильности.

Значения коэффициента вертикальной турбулентности

$$K_z(z) = \begin{cases} \frac{z}{h} K_z(h), & z < h \\ K_z(h), & z \leq h, \end{cases}$$

где h — высота приземного слоя, позволяет достаточно правильно распределять примесь по высоте, если только полагать h и $K_z(h)$ зависящими от класса атмосферной стабильности. Класс атмосферной стабильности задается на метеостанциях или визуально.

Данный программный комплекс предполагает наличие как площадных (расположенных на некотором участке земной поверхности), так и точечных (заводских труб) источников. Площадные источники характеризуются интенсивностью эмиссии Q_s , измеряемой в $г/(м^2 \cdot с)$ и численно равной массе загрязнителя, выделяемой с единицы площади в единицу времени. Точечный источник характеризуется интенсивностью эмиссии Q_e , измеряемой в $г/(м^3 \cdot с)$ и численно равной массе загрязнителя, выделяемой в единицу объема в единицу времени трубой высотой h_e и диаметром d_e . Высота и диаметр трубы а также скорость вылета v_e и температура t_e газов, влияют на эффективную высоту подъема шлейфа.

Для расчета полей ветра над холмистой местностью и в условиях городской застройки построены соответствующие алгоритмы. **WFM**-модель — модель ветрового поля над местностью с невысокими холмами. Модель описывает поворот вектора скорости ветра и изменение его модуля при безотрывном обтекании холмов. Описание базируется на начальном приближении для ветрового поля. Затем оно корректируется путем минимизации дивергенции и сглаживания. **URBAN**-модель — модель поля ветра в условиях городской застройки описывает поворот вектора скорости ветра и изменение его модуля при обтекании воздушных масс вокруг домов или крутых препятствий. Описание также базируется на начальном приближении ветрового поля и его последующей корректировке в каждой точке пространства между домами путем минимизации дивергенции и сглаживания. Все системы замкнуты и базируются на эмпирических измерениях и аппроксимации на их основе функциональных зависимостей физических величин от пространственно-временных координат расчетной области.

Пакет всё время находится в процессе усовершенствования, так как любая конкретная реальная проблема требует своей постановки задачи.

2. Некоторые практические задачи

Важным вопросом является построение по известным дискретным значениям высоты верхней границы пограничного слоя H функциональной зависимости $H = f(x, y, t)$, которая дает ограниченный профиль значений. В данной работе предлагается оригинальный метод экстраполяции функции f . Она должна быть дифференцируемой по пространственным и временным координатам. В дальнейшем величина H используется в транспортно-диффузионном уравнении, а ее значения на метеостанциях в моменты измерений должны совпадать с результатами этих измерений.

Приведём вывод этой функциональной зависимости в качестве примера численного моделирования.

Пусть имеются M метеостанций, причем для каждой станции задан набор из N значений величины H (H_n^i , $i = 1, \dots, M$, $n = 1, \dots, N$) для N метеоэпизодов. Длительность n -го эпизода обозначим за Δt_n . Определим величину \bar{H}^i для i -й метеостанции как

$$\bar{H}^i = \frac{\sum_n H_n^i \Delta t_n}{\sum_n \Delta t_n}.$$

Тогда зависимость от времени высоты верхней границы пограничного слоя на данной

станции может быть аппроксимирована с помощью выражения

$$H^i(t) = \bar{H}^i + \sum_n \frac{k_n^i}{1 + \varepsilon(t - \tau_n)^2}, \quad i = 1, \dots, M,$$

где ε — положительный параметр, τ_n — момент в пределах n -го метеоэпизода, в который снимаются измерения, т.е. $H^i(\tau_n) = H_n^i \forall i = 1, \dots, M$; k_n^i — коэффициенты, для i -й станции удовлетворяющие системе N линейных уравнений, выражающей совпадение значений функции $H^i(t)$ с измеренными значениями величины H для всех моментов измерений ($t = \tau_n, n = 1, \dots, N$) и решаемой методом Гаусса:

$$H_n^i = \bar{H}^i + \sum_{j=1}^N \frac{k_n^j}{1 + \varepsilon(\tau_n - \tau_j)^2}, \quad i = 1, \dots, M, \quad n = 1, \dots, N.$$

После аппроксимации во времени величины H для всех метеостанций (построения функций $H^i(t), i = 1, \dots, M$) выполняется аппроксимация по пространству для любого момента времени t . Пусть

$$H(x, y, t) = \bar{H}(t) + \sum_{i=1}^M \frac{k^i(t)}{1 + \delta r^i(x, y)},$$

$$\bar{H}(t) = \frac{1}{L_x L_y} \iint_{\Omega} H_a(x, y, t) dx dy,$$

где $r^i(x, y)$ — расстояние от точки (x, y) до i -й станции, $H_a(x, y, t)$ — функция, значение которой в точке (x, y) в момент времени t равно значению H в тот же самый момент на ближайшей станции, L_x, L_y — размеры прямоугольной расчетной области Ω , δ — положительный параметр, $k^i(t)$ — коэффициенты, удовлетворяющие системе M линейных уравнений, выражающей совпадение значений функции $H(x, y, t)$ со значениями величины $H^i(t)$ в точках расположения метеостанций ($x = x^i, y = y^i, i = 1, \dots, M$), решаемой методом Гаусса

$$H(x^i, y^i, t) \equiv H^i(t) = \bar{H}^i + \sum_{j=1}^N \frac{k^j(t)}{1 + \delta r^j(x^i, y^i)}, \quad i = 1, \dots, M,$$

где (x^i, y^i) — координаты i -й метеостанции. Искомая функциональная зависимость построена.

Таким образом мы имеем аппроксимацию высоты слоя перемешивания в виде суперпозиции колоколообразных функций, которая дает ограниченный профиль значений.

Создание метода аппроксимации по времени для высоты слоя перемешивания потребовалось в связи с необходимостью учитывать особые случаи задания исходных данных расположения источников и метеостанций. Такая необходимость была выявлена в результате проведения вычислительных экспериментов при отладке одного из исполнительных модулей для международного проекта АИДАИР 1388 программы "Эврика" европейской комиссии по охране окружающей среды.

На комплексе TIMES по заказу института гражданской авиации РФ были выполнены вычислительные эксперименты для задач безопасности окружающей среды при эксплуатации авиапромышленных комплексов [3]. Каждая практическая задача требует разработки

своей версии пакета. Поэтому пакет создавался как модульная система. Отправной моделью для создания схемы расщепления по физическим процессам для численного решения уравнений переноса в данном конкретном случае послужил классический метод частиц в ячейке. Однако по мере решения прикладных задач был разработан оригинальный по принятым допущениям метод частиц, не имеющий аналогов в литературе.

Аэродромы являются объектами, создающими значительное загрязнение атмосферного воздуха. Основными источниками загрязнения являются двигатели самолетов. Основным загрязняющим веществом является диоксид азота, который образуется за зоной горения топлива в результате взаимодействия азота воздуха с кислородом. Рассмотрены процессы распространения выхлопных газов как вблизи аэродромов в условиях городских застроек так и на больших расстояниях от источника загрязняющих веществ.

Горячие газы, истекающие из сопла двигателя, попадая в более холодную атмосферу, при наличии температурной стратификации атмосферы поднимаются вертикально вверх с ускорением, определяемым законом Архимеда. Они поднимаются до некоторой высоты, пока скорость подъема не обратится в нуль, а температуры и давления у поднимающихся газов не выровняются с температурой и давлением окружающей атмосферы. Затем облако диффундирует в атмосфере за счет адвекции в поле ветра и диффузии в турбулентной атмосфере.

Эффективная высота подъема выхлопных газов может составлять сотни и даже тысячи метров. Для примера рассчитаны параметры такого подъема для Боинга. Температура выхлопных газов Боинга порядка 300°C . Высота подъема порядка тридцати километров.

Рассматриваемое облако под действием силы

$$f = g\rho - g\rho^\otimes,$$

где f — сила, вызывающая вертикальный подъем облака, g — ускорение свободного падения, ρ — плотность воздуха, ρ^\otimes — плотность выхлопного газа, приобретает вертикальное ускорение и начинает смещаться. Величина этого ускорения при некоторых условиях

$$\frac{d^2t}{dt^2} = g \frac{T^\otimes - T}{T},$$

где T^\otimes — температура выхлопных газов, T — температура окружающего воздуха.

При этих перемещениях температура выхлопных газов в адиабатических условиях будет изменяться по закону

$$T^\otimes = T_0^\otimes - \gamma_a \Delta z,$$

где T_0^\otimes — начальная температура, γ_a — градиент температуры газов, равный $1^\circ\text{C}/100\text{м}$, Δz — высота подъема.

Для окружающего воздуха

$$T = T_0 - \gamma \Delta t,$$

где γ — градиент температур при наличии температурной стратификации атмосферы.

Высота подъема или уровень конвекции

$$\Delta z = h = \frac{\Delta T_0}{\gamma_a - \gamma}.$$

На основании этих формул можно сделать вывод, что нагретые газы сначала ускоренно летят вверх, но по мере остывания замедляются и достигают состояния равновесия. При исходных данных для Боинга высота подъема может достигать 3700 м и облако будет подниматься со средней скоростью порядка 11 м/с. Эта модель предполагает метод частиц.

Она была удобна для встраивания в пакет "TIMES" поэтому последняя версия "TIMES" разработана с применением метода разделения по физическим процессам на основе специально адаптированного метода частиц в ячейках [4].

Облако загрязняющих примесей в окружающем воздухе над аэродромом формируется при соответствующих атмосферных метеорологических условиях и является совокупностью нескольких источников. Поэтому начальное распределение примеси над аэродромом при моделировании процессов переноса примеси в атмосфере представлено набором площадных источников. Сравнительно низкими источниками являются двигатели самолетов при движении по летному полю: перрону, рулежным дорожкам, при прогреве двигателей на старте и пробеге по взлетно-посадочной полосе (ВПП). Высокими источниками являются двигатели самолетов после отрыва от земли. При этом, если принять за Q_0 начальную эмиссию, выделяющуюся при отрыве самолётов от земли, то при отрыве самолетов от земли и дальнейшем взлёте концентрация в спутном следе самолёта выражается формулой

$$C = \frac{Q_0}{\sqrt{2(\sin \alpha)a\Delta h}},$$

где Q_0 — концентрация эмиссии газов при отрыве самолёта, α — угол наклона траектории взлёта самолёта к взлётной полосе, a — ускорение самолёта при взлёте, h — высота.

В процессе постановки вычислительных экспериментов было представлено последовательное развитие ситуации на различные моменты времени. Было видно, как облако выхлопных газов, усреднённое на временном отрезке в 20 минут, отрывается от земли, размывается по объёму и переносится по ветру.

Эти же вычислительные эксперименты легли в основу проекта прогноза экологической ситуации в Москве за год до лета 2010 года. Когда разразилась экологическая катастрофа в атмосфере Москвы, были полностью подтверждены прогнозы, опубликованные в отчёте 2009 года по проекту РФФИ [5].

Проект был направлен на построение математических моделей, вычислительных методов и алгоритмов и интегрированных экспертных систем для прогнозирования качества окружающей среды через длительный период времени при антропогенных и техногенных воздействиях. Основная идея проекта состояла в том, чтобы разработать системный подход к математическому прогнозированию для постановки вычислительных экспериментов при многофакторном анализе влияния развития различных социальных структур в течение продолжительного времени на окружающую среду мегаполиса Москва. В проекте были проведены фундаментальные исследования влияния конкретных характеристик состояния атмосферных слоёв на приземный слой перемешивания, определяющий качество воздуха, окружающего человека в мегаполисе. Было последовательно выявлено, что решающими факторами для состояния атмосферы в городе является роза ветров, плотность застройки и вертикальный градиент температур. При неблагоприятных метеорологических условиях резко уменьшаются коэффициенты диффузии и рассеивания токсичных выхлопных газов и, как следствие, резко увеличение задымлённости воздуха.

Заключение

Суммарный эффект от техногенной деятельности в Москве уже превысил все допустимые нормы, особенно при таких обстоятельствах, как чрезмерная плотность автомобильных потоков, недостаточная площадь проезжей части города, приведённые погодные условия. Набирая статистику периодичности повторяемости таких погодных условий, можно спрогнозировать качество воздуха в мегаполисах на длительный период

времени. Сейчас в новом проекте от качественной картины предполагается перейти к вполне конкретным вычислительным количественным исследованиям.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №11-01-00444-а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белов И.В., Беспалов М.С., Клочкова Л.В., Павлова Н.К., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф., “Сравнительный анализ некоторых математических моделей для процессов распространения загрязнений в атмосфере”, *Математическое моделирование*, **11**:7 (1999), 52–64.
2. Белов И.В., Беспалов М.С., Клочкова Л.В., Кулешов А.А., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф., “Транспортная модель процессов распространения газообразных примесей в атмосфере города”, *Математическое моделирование*, **12**:11 (2000), 15–28.
3. Клочкова Л.В., “Программное обеспечение "TIMES" для решения актуальных задач экологии при эксплуатации аэрокосмических комплексов”, *Известия РАН. Теория и Системы Управления*, 2006, № 1, 92–102.
4. Клочкова Л.В., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф., “Вычислительные алгоритмы конвективного переноса токсичных веществ при математическом прогнозировании качества окружающей среды в мегаполисах”, *Известия РАН. Теория и Системы Управления*, 2009, № 4, 163–176.
5. “Годовой отчёт по проекту РФФИ, грант 08-01-00435-а”, 2009.

Mathematical modeling of air quality on the prolonged period of time

© L.V Klochkova⁴, J.A. Poveschenko⁵, V.F. Tishkin⁶

Abstract. In work the results received during development of new executive modules for integrated program complex TIMES and methods of mathematical forecasting of quality of an environment as the system approach to the multifactorial analysis of influence of various influences are presented. Examples of the decision of some practical problems are resulted.

Key Words: the mathematical modeling, the integrated program complexes, processes of propagation of pollution in an atmosphere.

⁴ Senior Research Fellow of Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow; klud@imamod.ru.

⁵ Leading Research Fellow of Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow; poveschenko@keldysh.ru.

⁶ Deputy Director of Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS, Moscow; tishkin@imamod.ru.