УДК 575:636.082.22:639.3

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕГИОНАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ[1]

Г. И. Марчук[2], ***А. Е. Алоян***[3]

MATHEMATICAL MODELING OF REGIONAL ENVIRONMENTAL PROBLEMS

Marchuk G. I., Aloyan A. E.

The work gives a brief description of the structure of mathematical models presenting the dynamics of meso-scale and regional atmosphere processes and transport of multi-component gas admixtures and aerosols considering their transformation. The processes of photochemical transformation and aerosols formation by nucleation, condensation, evaporation and coagulation have been taken into consideration. The optimization problem dealing with the control over sources intensity has been solved, and the results of numerical experiments for different regions demonstrating some possibilities of mathematical models for solving the problems of ecological forecasting have been obtained.

В работе кратко описана структура математических моделей динамики мезомасштабных и региональных атмосферных процессов и переноса многокомпонентных газовых примесей и аэрозолей с учетом их трансформации. В моделях учитываются процессы фотохимической трансформации и формирования аэрозолей за счет нуклеации, конденсации, испарения и коагуляции. Рассмотрено решение оптимизационной задачи по управлению мощностью источников. Приведены результаты численных экспериментов для различных регионов, демонстрирующие некоторые возможности математических моделей для решения задач экологического прогнозирования.

Введение

В результате хозяйственной деятельности человека в атмосферу выбрасывается большое количество химических веществ, находящихся в газовом и аэрозольном состояниях. В атмосфере эти вещества претерпевают ряд физико-химических изменений за счет механизмов фотохимической трансформации, нуклеации, конденсации, испарения и коагуляции. Все эти механизмы взаимосвязаны, а каждый из них является частью общей комплексной задачи в области охраны окружающей среды. Среди антропогенных выбросов особо опасны окислы серы, азота, металлическая пыль и др. Например, выбросы окислов серы, переходя в аэрозольную фазу, способствуют выпадению кислотных дождей, которые в свою очередь причиняют значительный ущерб биосфере. В атмосферных дисперсных системах важное место занимают сульфатные аэрозоли. Эти частицы формируются в разных частях атмосферы: в свободной атмосфере, в морском пограничном слое, в арктических областях, в атмосфере загрязненных городов и др.

Среди прочих вопросов остро стоит проблема загрязнения нижней тропосферы озоном. Тропосферный озон является ключевым индикатором фотохимического загрязнения воздуха. Это вторичный загрязнитель, образующийся в результате сложных химических реакций между азотсодержащими газами и летучими органическими соединения-

[1]Данная работа выполнена при поддержке РФФИ (03-05-64484), РФФИ р2003юг (03-01-96519, 03-01-96587, 03-01-96546), МНТЦ (1908).

[2]Марчук Гурий Иванович, академик РАН, д-р физ.-мат. наук, Институт вычислительной математики РАН, советник Президиума РАН.

[3]Алоян Арташ Еремович, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики РАН.

ми (ЛОС) под воздействием солнечной радиации.

Для моделирования процессов образования аэрозолей исключительное значение имеют получающиеся после фотохимической трансформации вещества. Перенасыщение паров этих веществ приводит к образованию первичных кластеров, которые являются начальной стадией для образования аэрозолей. Затем они могут взаимодействовать с ядрами фоновой атмосферы и объединяться с каплями воды определенных размеров с последующей коагуляцией этих частиц.

В большинстве трехмерных моделей динамики аэрозолей предполагается, что существует мгновенное равновесие в системе газ–аэрозоль. Однако, как известно [5, 6], в определенных условиях равновесие устанавливается довольно медленно по отношению к временному масштабу протекания других процессов. Поэтому необходимо построить соответствующие численные модели с использованием неравновесной функции распределения. Одним из важных требований к моделям является соблюдение законов сохранения массы или числа частиц. Как правило, атмосферные примеси имеют полидисперсный характер, поэтому для математического моделирования их динамики нужно учитывать два основных механизма: 1) перенос и диффузию примеси; 2) изменение концентрации примеси с учетом ее трансформации, а также изменчивость дисперсного состава за счет кинетических процессов. Поскольку эти процессы протекают в турбулентной атмосфере, а земная поверхность в большинстве случаев орографически и термически неоднородна, то задачу динамики газовых примесей и аэрозолей следует решать совместно с моделями гидротермодинамики атмосферных процессов. Такой подход позволит более точно воспроизвести пространственно-временную изменчивость полей метеоэлементов, турбулентных характеристик течений, концентрации газовых примесей и аэрозолей с учетом изменчивости спектра размеров частиц. Рассмотрим базовые численные модели, используемые для описания изменчивости газовых примесей и аэрозолей в атмосфере в региональном масштабе. Основные базовые модели для решения таких задач изложены в [1–7].

1. Модель гидротермодинамики

Запишем уравнения гидротермодинамики мезомасштабных атмосферных процессов в системе координат x_i, направляя ось $x_1 = x$ на восток, ось $x_2 = y$ — на север, а ось $x_3 = z$ — вертикально вверх. Основные уравнения запишем в дивергентной (потоковой) форме. Представим термодинамические поля в виде суммы двух слагаемых

$$\varphi = \bar{\varphi}(z) + \varphi'(x, y, z, t), \quad \varphi = \rho, \vartheta, q, p, \quad (1.1)$$

где ρ — плотность воздуха; ϑ — потенциальная температура; q — удельная влажность; p — давление. Тогда уравнение движения можно представить в индексных обозначениях в следующем виде:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p'}{\partial x_i} - 2\varepsilon_{ijk}\bar{\rho}\Omega_j u_k + \\ + \delta_{i3}\bar{\rho}g\left(\frac{\vartheta'}{\bar{\vartheta}} + \varepsilon q\right) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (1.2)$$

где $u_1 = u$, $u_2 = v$, $u_3 = w$ — компоненты вектора скорости $\mathbf{u}$ по направлениям x, y, z соответственно; ε_{ijk} — абсолютно антисимметрический тензор; Ω_j — угловая скорость вращения Земли; δ — символ Кронекера; g — ускорение свободного падения; $\varepsilon = \dfrac{R_v}{R_d} = 0,608$; R_v и R_d — газовые постоянные для сухого воздуха и водяного пара соответственно; τ_{ij} — тензор вязких напряжений Рейнольдса.

Уравнение неразрывности имеет вид

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad j = 1, 2, 3. \quad (1.3)$$

Законы сохранения энергии и массы водяного пара задаются в виде

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\vartheta)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j\vartheta)}{\partial x_j} = -\frac{L\vartheta}{c_p T}\Phi + \frac{\partial H_j}{\partial x_j}, \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}q)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_j q)}{\partial x_j} = -\Phi + \frac{\partial Q}{\partial x_j}, \quad (1.5)$$

где L — удельная теплота конденсации; T — абсолютная температура; Φ — масса водяного пара, концентрируемого в единичном объеме за единицу времени; H_i, Q_i — турбулентные потоки тепла и влаги.

Область изменения пространственных переменных

$$D = \big\{(x, y, z) : x \in [0, X], y \in [0, Y], \\ \delta(x, y) \leqslant z \leqslant H\big\},$$

где X, Y — заданные параметры, определяющие горизонтальные размеры области; $\delta(x, y)$ — функция, описывающая рельеф поверхности земли; H — верхняя граница воздушной массы. При наличии орографии система уравнений (1.2)–(1.5) запишется в новой системе координат с помощью следующего преобразования:

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

2. Модель переноса газовых примесей и аэрозолей

Основные уравнения для скорости изменения концентраций газовых примесей и аэрозолей запишем в виде [8]

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \mathbf{u}\,\mathrm{grad}\, C_i = \\ = F_{\text{газ}} - P_{\text{нукл}} - P_{\text{конд}} + P_{\text{хим}} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial C_i}{\partial y}, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + \mathbf{u}\,\mathrm{grad}\, \varphi_k - w_g \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \\ = F_{\text{аэр}} + P_{\text{нукл}} + P_{\text{конд}} + P_{\text{коаг}} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial \varphi_k}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial \varphi_k}{\partial y}. \quad (2.2)$$

Здесь C_i $(i = 1, 2, \ldots, N_g)$, φ_k $(k = 1, 2, \ldots, N_a)$ — концентрации газовых примесей и аэрозолей соответственно; N_g — количество газовых компонент; N_a — количество аэрозольных фракций; $F_{\text{газ}}$, $F_{\text{аэр}}$ — источники газовых примесей и аэрозолей; $P_{\text{нукл}}$, $P_{\text{конд}}$, $P_{\text{коаг}}$, $P_{\text{хим}}$ — операторы нуклеации, конденсации, коагуляции и фотохимической трансформации соответственно (их вид приводится далее); K_x, K_y, K_z — коэффициенты турбулентной диффузии в направлениях x, y, z соответственно.

На боковых границах области D принимаются условия плавного выхода на фоновые значения соответствующих полей метеоэлементов. Эти условия задаются либо для самих функций состояния, либо для их отклонений от фоновых значений. Предполагается, что на верхней границе воздушной массы $z = H$ возмущения, обусловленные неоднородностями поверхности, затухают. На нижней границе взаимодействие воздушных масс с поверхностью земли описывается с помощью параметризационной модели приземного слоя атмосферы. Температура на поверхности земли вычисляется из уровня баланса тепла на границе раздела атмосфера–почва с учетом тепловлагообмена в почве.

3. Фотохимическая трансформация

В больших городах и индустриальных регионах в атмосферу выбрасывается огромное количество газовых веществ, которые трансформируются, вступая в химические реакции, что приводит к образованию вторичных загрязнителей, не присутствовавших в первоначальных выбросах (например, озон, ПАН и др.) Некоторые радикалы, такие, как OH, HO_2, $O^3(P)$, NO_3, разрушают выбросы органических газов. Среди биогенных веществ особое место занимают изопрен и терпены. Для формирования сульфатных аэрозолей наиболее важны газофазные химические реакции, приводящие к образованию паров серной кислоты из выбросов диоксида серы.

Итак, предположим, что в атмосферу выбрасываются газовые примеси NO, NO_2, SO_2, CO, CH_4, H_2CO, ISOP, ALD2, OLE, PAR, TOL. Реакции, инициируемые солнечным светом, приводят к возникновению ряда новых химически активных атомов, свободных радикалов и других веществ, в том числе и H_2SO_4. В фотохимической модели учитываются 204 химические реакции для 44 газовых веществ. Эта модель детально изложена в [3, 9, 10].

Используя кинетические законы для элементарных реакций и применяя баланс масс к каждому веществу, получим систему уравнений для скорости изменения концентрации в каждой ячейке

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = P_i - L_i \varphi_i \quad i = 1, 2, \ldots, n \qquad (3.1)$$

с начальными условиями $\varphi_i(t_0) = \varphi_{0i}$. Здесь операторы P_i и L_i описывают интенсивность генерации и гибели веществ.

4. Модель конденсации, нуклеации и коагуляции

Образование новых ядер из паров происходит в основном с помощью бинарной гомогенной нуклеации капель серной кислоты и воды. В отличие от [19], где скорость гомогенной нуклеации зависела от двух переменных (массовой концентрации паров и температуры), в данной работе учитывается и вклад водяного пара. Таким образом, скорость нуклеации J зависит от трех основных переменных: массовой концентрации кислоты в паровой фазе (C), относительной влажности воздуха (Rh) и температуры (T). Пусть в атмосфере в пересыщенном паре при температуре T и давлении P_v имеется бинарный кластер, состоящий из n_w молекул вещества w и n_a молекул для a с мольными фракциями $x_{iv}(i = w, a)$. Будем считать, что частицы сферической формы и находятся в жидкой фазе. Тогда свободную энергию для образования жидкого зародыша в бинарной смеси можно представить в следующем виде:

$$W = \Delta G = n_w \Delta\mu_w + n_a \Delta\mu_a + A\sigma, \qquad (4.1)$$

где ΔG — изменения свободной энергии Гиббса; $\Delta\mu_i = \mu_{il}(T, P_v, x_{il}) - \mu_{iv}(T, P_i, x_{iv})$; μ_{il} и μ_{iv} — химические потенциалы в жидкой и паровой фазах соответственно; A — площадь поверхности; σ — поверхностное натяжение. Важно отметить, что для пересыщенного пара функция ΔG имеет максимум в точке с критическим радиусом r^*. Пар пересыщен по отношению ко всем каплям, у которых $r > r^*$. Здесь используется модель параметризации нуклеации, изложенная в работах [11, 12]. Критический кластер находится из уравнения

$$\nu_w(x^*) \ln \frac{\rho_a^{free}}{\rho_{a,s}^{free}(x^*)} = \nu_a(x^*) \ln \frac{\rho_w^{free}}{\rho_{w,s}^{free}(x^*)}, \qquad (4.2)$$

где ν_w, ν_a — парциальные молярные объемы воды и кислоты соответственно; ρ_i^{free} — численная концентрация свободных молекул компоненты i в нуклеирующем паре; $\rho_{i,s}^{free}(x)$ — численная концентрация компоненты i в насыщенном паре над раствором с серной кислотой с мольной фракцией x. Звездочкой отмечен критический кластер. Известно, что серная кислота имеет тенденцию образовывать гидраты в паровой фазе. Эти мелкие кластеры обладают отрицательной энергией.

Мы не будем останавливаться на методах учета механизмов гидратации в процессе нуклеации, они достаточно полно изложены в [11, 12].

Итак, радиус критического кластера, определяемый из уравнения Кельвина, имеет вид

$$r^* = \frac{2\sigma(x^*)\nu_i(x^*)}{kT \ln\left(\rho_i^{free} \Big/ \rho_{i,s}^{free}(x^*)\right)}, \qquad (4.3)$$

работа для формирования критической нуклеации

$$w^* = \frac{4}{3}\pi r^{*2}\sigma(x^*), \qquad (4.4)$$

общее выражение для скорости нуклеации

$$J = z\rho(1,2) \exp\left[-\frac{w^* - w(1,2)}{kT}\right], \qquad (4.5)$$

где z — кинетический коэффициент Зельдовича; $\rho(1,2)$, $w(1,2)$ — численная концентрация и энергия образования дигидрата серной кислоты соответственно. Произведение двух последних членов представляет собой равновесную концентрацию критического ядра. Из выражения (4.5) вычислим скорость нуклеации J (в $1/\text{см}^3$ с). Теперь выпишем уравнение для эволюции спектра масс посторонних частиц за счет присоединения молекул пара, а также вследствие нуклеации вновь образованных частиц:

$$\frac{\partial\varphi_g}{\partial t} + \mathbf{u}\,\mathrm{grad}\,\varphi_g - w_g\frac{\partial\varphi_g}{\partial t} + \frac{\partial v_g\varphi_g}{\partial g} = J_{\text{нукл}}(\varphi_g, t) + \frac{1}{2}\int_0^g K(g, g_1)\varphi_{g-g_1}\varphi_{g_1}dg_1 - \int_0^\infty K(g, g_1)\varphi_{g_1}\,dg_1, \qquad (4.6)$$

где φ_g — концентрация частиц с массой, заключенной в интервале от g до $g + dg$;

$J_{\text{нукл}}(\varphi_g, t)$ — интенсивность образования новых частиц с массой g; $K(g, g_1)$ — частота столкновения частиц массами g и g_1; g_1 — текущая переменная (масса), по которой производится интегрирование.

Уравнение (4.6) учитывает процессы конденсационного роста и слияния частиц из-за коагуляции. Численный алгоритм его решения приведен в [3–8].

5. Сопряженная задача

Сопряженные задачи, дополняя основные системы уравнений, играют важную роль в диагностических исследованиях качества моделей и экологического прогнозирования. Непосредственное решение сопряженных задач участвует в вычислении функции чувствительности, которые по определению являются частными производными заданных характеристик модели по параметрам. В задачах экологии объектом изучения иногда служит не само поле концентрации, а некоторые функционалы от этого поля. К числу таких функционалов относятся, например, среднегодовая концентрация различных субстанций, полное количество примесей, осевших в конкретном регионе, экономический ущерб, наносимый окружающей среде, и др. В таких задачах весьма эффективно использование сопряженных функций.

Рассмотрим функционалы от решения φ следующего вида:

$$J = \int_0^T dt \int_D p\varphi \, dD, \tag{5.1}$$

где $p = p(x, y, z, t)$ — заданная функция из $L_2(D_t)$, $D_t = \{D \times [0, T]\}$. Если, например,

$$p = \begin{cases} p_0, & (x, y, z) \in \omega, \\ 0, & (x, y, z) \in D \backslash \omega, \end{cases} \qquad p_0 > 0, \quad \omega \subset D, \tag{5.2}$$

то функционал J представляет собой суммарную концентрацию примеси в выделенной подобласти ω области D, взвешенную с весом p_0. Область ω соответствует зоне, где производится оценка загрязнения.

В зависимости от задания области ω мы можем получить различные интегральные характеристики поля загрязнения примесей. Итак, задача сводится к оценке функционалов вида (5.1), определяемых на множестве функций состояния, удовлетворяющих исходной задаче. Для оценки функционала J целесообразно реализовать подход, основанный на использовании сопряженных уравнений [1, 14, 15]. С его помощью можно оценить степень потенциальной опасности загрязнения атмосферы в области ω от всех источников, расположенных в области D_t. Сопряженная задача будет иметь вид

$$-\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} - \operatorname{div} \mathbf{u}\varphi^* - \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} - \\ - \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial \varphi^*}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial \sigma} K_\sigma \frac{\partial \varphi^*}{\partial \sigma} = p, \tag{5.3}$$

$$\varphi^* = 0 \text{ при } t = T,$$

где p — функция, определяющая функционал (5.1). Краевые условия для уравнения (5.3) идентичны условиям уравнения (2.1).

Как следует из общей теории, задача (5.3) корректна при решении от $t = T$ к $t = 0$. Поэтому в качестве «начального» условия выберем $\varphi^* = 0$ при $t = T$. Проведем некоторые преобразования. Умножим уравнение (2.1) на φ^* скалярно, а уравнение (5.3) на φ, из одного результата вычтем другой и проинтегрируем по времени на отрезке $[0, T]$. Интегрированием по частям с учетом граничных условий из полученного соотношения с точностью до малых слагаемых получим другое представление для функционала J:

$$J = \int_0^T dt \int_D F\varphi^* \varphi dD. \tag{5.4}$$

Таким образом, общее количество примеси в области ω можно рассчитать, используя решение φ^* сопряженной задачи (5.3). Поясним физический смысл функции φ^*. Она является весовой функцией, определяющей вклад каждого источника загрязнения F и начального состояния функции $\varphi = \varphi_0$ в величину загрязнения атмосферы в выделенной подобласти ω. Итак, она характеризует степень опасности загрязнения атмосферы в области ω от источника, который может находиться в любой точке области D_t, т.е. вклад источника в функционал равен произведению

мощности выброса и значения функции φ^* при каждом t в той области, где размещен источник. По значениям функции φ^* можно районировать область D_t, выделяя опасные зоны по отношению к загрязнению атмосферы в области ω.

6. Модель управления мощностью источников

Рассмотрим оптимизационную задачу управления мощностью выбросов загрязняющих примесей по заданным критериям и ограничениям экологического и экономического характера. Для конкретности в качестве критерия оптимальности выберем условие минимизации величины ущерба, наносимого загрязнениями территории региона [7, 15, 16]. Пусть в области D_t находится n источников примесей с концентрациями φ_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$ и мощностями выбросов Q_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$. В этой же области имеется зона экологического контроля ω, которую условно назовем экологически значимой зоной. Рассмотрим функционалы

$$a_i^c = \int_{t_0}^{t_1} dt \int_{\omega} p_i \varphi_i (x, y, z, t)\, d\omega, \tag{6.1}$$

$$a_i = \int_{t_0}^{t_1} dt \int_{D} p_i \varphi_i (x, y, z, t)\, dD, \tag{6.2}$$

характеризующие суммарную концентрацию примесей в зоне ω и во всей области D, где p_i — весовая функция; φ_i — концентрация примесей, полученная из решения задачи (2.1) с источником единичной мощности, расположенным в точке $(x_i; y_i; z_i)$. Составляющие ущерба, наносимого источником с номером i в экологически значимой зоне и во всей области, запишем в виде

$$\alpha_i^c = a_i^c f_1(\varphi_i), \quad \alpha_i = a_i f_2(\varphi_i), \tag{6.3}$$

где $f_1(\varphi_i)$, $f_2(\varphi_i)$ — заданные функции от суммарной концентрации [15,17]. Следовательно, общий ущерб в экологически значимой зоне ω можно представить соотношением

$$Y^c = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^c Q_i (1 - e_i), \tag{6.4}$$

а во всей области D

$$Y_0 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Q_i (1 - e_i), \tag{6.5}$$

где e_i $(i = 1, 2, \ldots, n)$ — коэффициенты относительного снижения мощности источников. Задача оптимизации заключается в нахождении вектора $\mathbf{e} = \{e_i\}$, доставляющего минимум функционалу

$$Y^c = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^c Q_i (1 - e_i) \to \min_{e_i} \tag{6.6}$$

при ограничениях

$$\begin{gathered} 0 \leqslant e_i \leqslant 1, \\ k_1 Y_0 \leqslant \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Q_i (1 - e_i) \leqslant k_2 Y_0, \end{gathered} \tag{6.7}$$

где k_1, k_2 — коэффициенты, характеризующие необходимое сокращение ущерба. После нахождения коэффициентов e_i допустимые мощности источников $\bar{Q}_i$ вычисляются по формуле $\bar{Q}_i = Q_i(1 - e_i)$.

Отметим, что в ряде случаев реальный ущерб редко имеет линейную зависимость от концентрации вредных веществ, выпавших за длительный период времени. Как правило, эта зависимость имеет более сложный вид [17]. Покажем на конкретном примере, почему может оказаться, что ущерб нелинейно зависит от концентрации. Предположим, что над лесом площадью S единовременно с осадками выпало Q вредных веществ, из-за которых вымирает доля αQ этого леса. Ущербом будем называть затраты на восстановление утраченного леса. Примем эти затраты пропорциональными времени, необходимому для восстановления. Найдем это время в предположении, что лес растет в геометрической прогрессии с фактором $\delta = 1 + \beta$, из условия

$$\begin{gathered} S = S\,(1 - \alpha Q)\,(1 + \beta)^t\,, \\ t = \frac{\ln \frac{1}{1 - \alpha Q}}{\ln(1 + \beta)}. \end{gathered} \tag{6.8}$$

Например, если в результате загрязнения было поражено 20% леса ($\alpha Q = 0,2$), а лес растет со скоростью $\delta = 1,1$, то на восстановление потребуется 2,34 года; если поражено 50% леса, то время восстановления составит

уже 7,27 лет. Следует отметить, что характер поражения растительности тоже зависит от концентрации вредных веществ, но эта зависимость более сложная, чем αQ, а именно описывается функцией выпуклой вниз, тогда следует ожидать еще более выпуклого вида функции зависимости ущерба от концентрации вредных веществ. Статистические данные подтверждают подобный вид функции ущерба [17].

Теперь рассмотрим случай, когда функция ущерба квадратично зависит от суммарной концентрации. Действительно, любую функцию выпуклую вниз можно аппроксимировать квадратичной функцией с положительным коэффициентом при квадратичном члене. Итак, функция ущерба в охраняемой зоне D будет иметь вид

$$\sum_{i=1}^{n} (\alpha_i Q_i)^2. \tag{6.9}$$

Ущерб же в остальной области $G = D \backslash \omega$ равен

$$\sum_{i=1}^{n} (\beta_i Q_i)^2. \tag{6.10}$$

Заметим, что из-за весовой функции $p(x, y)$, содержащейся в коэффициентах β_i, коэффициенты β_i^2 при Q_i^2 в функции ущерба области ω в десятки и сотни раз превосходят коэффициенты α_i^2.

Поэтому аппроксимируем квадратичную функцию ущерба в области ω линейной функцией методом наименьших квадратов. В итоге, вместо набора коэффициентов β_i получим набор соответствующих им коэффициентов $\bar{\beta}_i$. Задачу минимизации ущерба теперь можно переписать в виде

$$\sum (\alpha_i Q_i)^2 \to \min_{Q_i} \tag{6.11}$$

при условиях

$$0 \leqslant Q_I \leqslant \bar{Q}_i, \tag{6.12}$$

$$kY_0 \leqslant \sum_{i=1}^{n} \beta Q_i \leqslant Y_0. \tag{6.13}$$

Задачи такого вида называют задачами квадратичного программирования, для их решения существует множество методов и программ. Здесь используется программа для решения задач квадратичного программирования, основанная на методе Вульфа [18]. Суть этого метода заключается в том, что для исходной задачи нелинейного программирования вида

$$Q(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{C} \mathbf{x} \to min \tag{6.14}$$

при

$$\mathbf{A}\mathbf{x} \leqslant \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \geqslant 0, \tag{6.15}$$

строится задача линейного программирования, решение которой совпадает с решением задачи (4.4). Для этого вводится новый вектор переменных $\mathbf{u}$ размерности k, где k — количество ограничений матрицы $\mathbf{A}$. Далее получаемая задача линейного программирования выглядит следующим образом:

$$\mathbf{I}_n \mathbf{x} + \mathbf{I}_k \mathbf{u} \to min \tag{6.16}$$

при условии, что

$$2\mathbf{x} + \mathbf{A}^T \mathbf{u} > p, \quad \mathbf{A}\mathbf{x} \leqslant \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \geqslant 0, \tag{6.17}$$

где $\mathbf{I}_n$ и $\mathbf{I}_k$ — квадратные единичные матрицы порядка n и k соответственно. Полученная задача линейного программирования решается обычным симплекс-методом. Следует отметить, что задача оптимизации ущерба имеет ненулевое решение, т.е. достижение оптимизации задачи вида (6.11)–(6.13) не требует полного закрытия предприятия ($Q = 0$), а предполагает регулирование выброса в пределах $Q = \left(0, \bar{Q}_i\right)$.

7. Результаты численных экспериментов

7.1. Фотохимическое загрязнение атмосферы

Расчеты проводились для двух регионов: Хьюстона–Гальвестона (США) и Москвы. Для первого региона данные о выбросах газовых веществ от точечных и площадных источников задавались из базы данных COAST (6–11 сентября 1993 г.) В этот период наблюдались высокие концентрации озона в нижних слоях атмосферы. Рассматриваемая область охватывает 320×240 км с горизонтальными шагами 4 км, а по вертикали — переменные шаги (верхняя граница области интегрирования расположена на высоте 2,3 км). Количество узловых точек —

82×62×15. Цель этих экспериментов состояла в том, чтобы наряду с фотохимическим механизмом показать и влияние атмосферной циркуляции на пространственно-временную изменчивость газовых примесей в рассматриваемом регионе. На рис. 1–2 приведены поля концентрации NO_2, озона и изопрена при $t = 12$ ч (рис. 1) и 24 ч (рис. 2) в единицах ppb.

Результаты численных экспериментов показали существенную суточную и пространственную изменчивость концентраций озона и других газовых примесей, что отчасти является следствием влияния атмосферной циркуляции в мезомасштабном пограничном слое и конкретной динамики их концентраций из-за переноса и фотохимической трансформации веществ. Полученные результаты свидетельствуют также о существенном влиянии изменений в выбросах окислов азота и летучих органических соединений на кинетику образования радикалов OH и HO_2 — важнейших промежуточных частиц. На рис. 3 приведены профили временной изменчивости среднечасовых концентраций озона в сопоставлении результатов расчета с данными наблюдений для интервалов времени несколько дней. Сопоставление показало их хорошее качественное и количественное согласие.

Следующие численные эксперименты проводились для г. Москвы и окружающего региона с целью исследования характеристик вторичного загрязнения атмосферы, обусловленного фотохимической трансформацией и образованием сульфатных аэрозольных частиц. Задавались мощности выбросов (SO_2, NO, NO_2) при эксплуатации нескольких московских ТЭЦ. На рис. 4 показаны векторные поля течения скорости ветра на высоте 250 м в моменты времени $t = 14$ и $t = 22$ ч. На рис. 5 представлено поле SO_2 на высоте 350 м.

Проведены две серии численных экспериментов: первая — в рамках трехмерной модели гидротермодинамики атмосферы с учетом фотохимической трансформации и переноса, вторая — образования сульфатных аэрозольных частиц в регионе г. Москвы. Схема реализации включает три основных этапа:

– моделирование атмосферной циркуляции для рассматриваемого региона при заданных параметрах подстилающей поверхности и фонового движения атмосферы;

– моделирование переноса от точечных источников, расположенных в городе, и трансформации многокомпонентных загрязняющих газовых примесей на фоне атмосферной циркуляции;

– моделирование формирования частиц новой фазы, обусловленной бинарной нуклеацией при наличии инородных частиц и кинетическими процессами конденсации и коагуляции.

Численные эксперименты проводились при следующих значениях параметров: шаг по времени — 600 с, шаги по горизонтали — 4 000 м, количество вертикальных уровней (с переменными шагами) — 20, верхняя граница — 2 000 м. Масса частиц изменяется в логарифмическом масштабе $2g_i = g_{i+1}$, где i и $i + 1$ — последовательные фракции в шкале линейных размеров (диаметров). Последовательные фракции связаны соотношением $\sqrt[3]{2}d_i = d_{i+1}$. Число фракций — 40, $d_{min} = 1$ nm, $d_{max} = 8,1$ μm.

На рис. 5 показано поле концентрации паров серной кислоты на высоте $z = 250$ м в момент времени $t = 14$ ч.

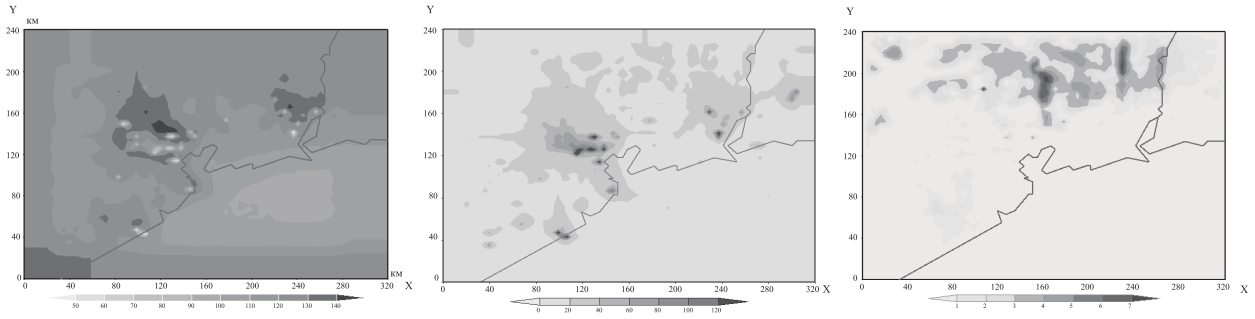
Так как наибольший интерес для формирования нуклеационных частиц представляют серная кислота и вода, поля других газофазных веществ, образующихся после фотохимических реакций, не приводятся.

На рис. 6 представлен критический радиус частиц.

На рис. 7 изображен рост числа частиц с радиусом r = 0,185 μm благодаря конденсации и коагуляции (z = 250 м, t = 48 ч).

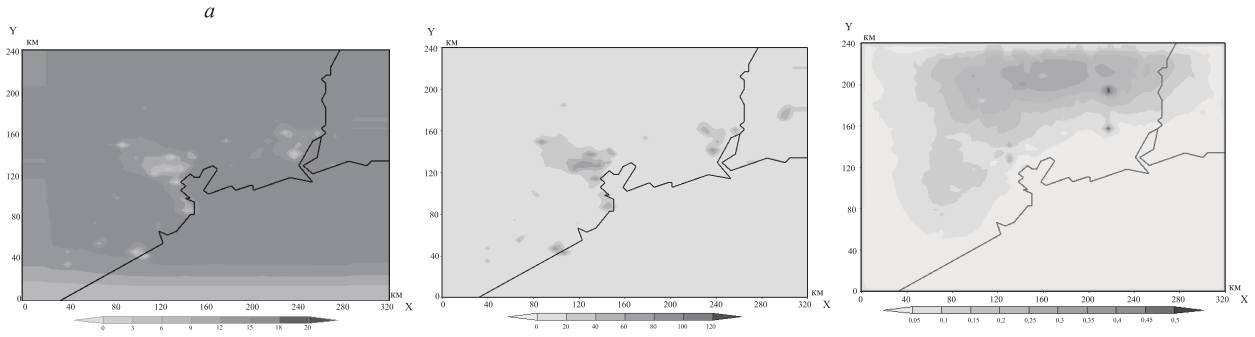
7.2. Черноморский бассейн

С использованием сопряженных функций проведены численные эксперименты по оценке чувствительности антропогенной нагрузки на бассейн Черного моря и вклада каждого из сопредельных государств. Расчеты проводились при следующих входных параметрах: число узлов сеточной области по долготе — 65, по широте — 41, по высоте — 15 (с переменным шагом до высоты около 20 км), горизонтальный шаг по обоим направлениям — 1,25°, шаг интегрирования по времени — 30 мин. На входе модели использовались метеорологические данные ECMWF и данные EMEP по эмиссиям SO_2 для стран Европы. Численное



а *б* *в*

Рис. 1. Концентрация озона ($а$), NO_2 ($б$) и изопрена ($в$) на высоте 10 м и $t = 12$ ч



а *б* *в*

Рис. 2. Концентрация озона (а), NO_2 ($б$) и изопрена ($в$) на высоте 10 м и $t = 24$ ч

моделирование распространения SO_2 в Европейском регионе велось в области Северного полушария. На рис. 8 представлена гистограмма, показывающая в процентном отношении вклад государств, окружающих Черное море, в общее загрязнения бассейна. На рис. 9 дано поле функции чувствительности бассейна Черного моря к загрязнению.

7.3. Оптимизация мощности источников в г. Москве

На первом этапе решалась задача гидротермодинамики для пяти характерных для данной местности направлений фонового потока: восточного (В), северо-западного (СЗ), юго-западного (ЮЗ), северо-восточного (СВ) и юго-восточного (ЮВ).

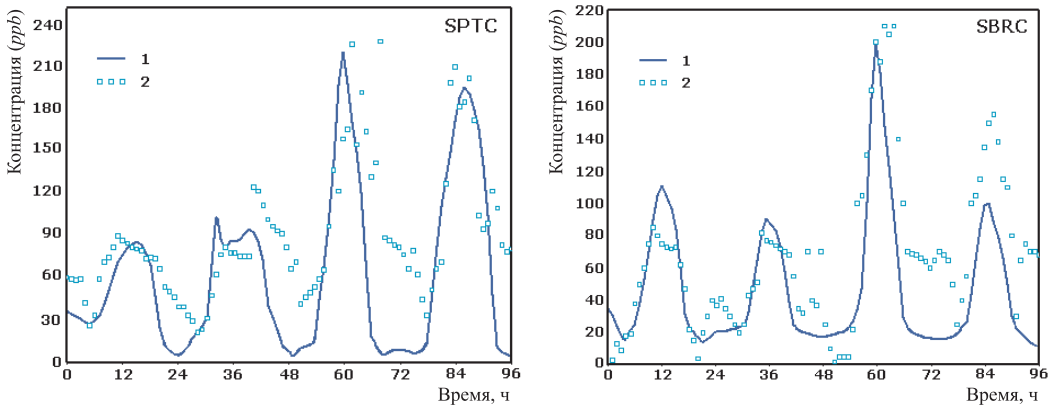
На следующем этапе решалась задача переноса и диффузии примеси. В качестве загрязняющих источников были выбраны Московский нефтеперерабатывающий завод, комплекс заводов ЗИЛ и Московская мусоросжигательная станция. Они расположены в узлах сетки (14, 8, 3), (12, 9, 3) и (9, 16, 3) соответственно.

На рис. 10 показано расположение источников примеси и защищаемых от загрязнения областей. На фоне сформировавшихся полей течения при разных направлениях фонового потока вычислялись поля концентрации примесей.

Третьим этапом численных экспериментов было решение задачи оптимизации ущерба, наносимого примесями. При решении задачи использовались данные Гидрометцентра России о среднегодовой розе ветров в г. Москве и Московской области. Для вычисления суммарных объемов загрязнения в различных зонах рассматриваемой области поля концентраций примесей, полученные в результате решения задач переноса и диффузии, складывались с весами, соответствующими розе ветров.

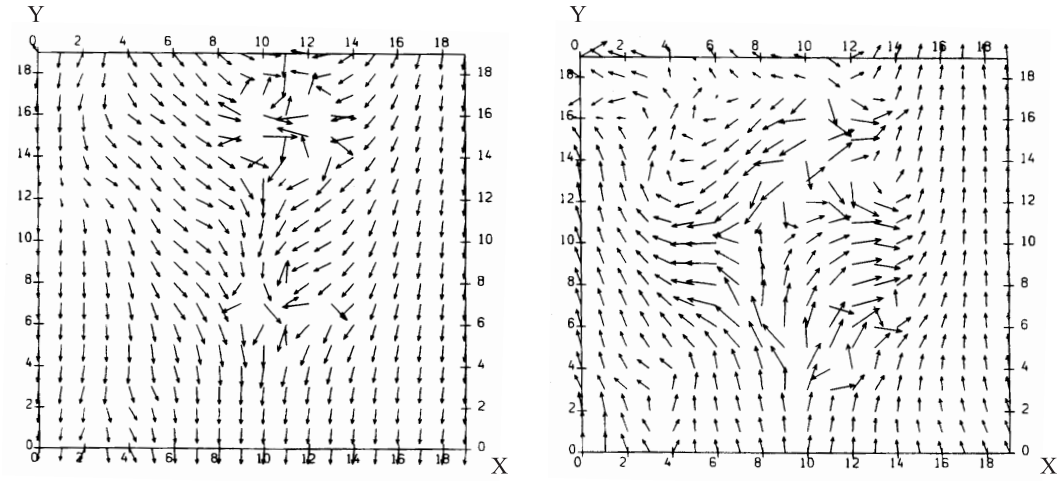
В численных экспериментах весовая функция $p(x, y)$ была взята равной 0,3 в черте города и 0,1 в остальной области. Вес парковых зон был взят равным единице.

Численное решение задачи квадратичного программирования показало, что при заданном 10-кратном уменьшении ущерба в неохраняемой зоне ($k = 0,1$) для минимизации



а б

Рис. 3. Сопоставление результатов расчета с данными наблюдений по среднечасовым концентрациям озона: (*а* — результаты расчетов, *б* — данные наблюдений)



$z = 250$ м, $t = 14$ ч $z = 250$ м, $t = 22$ ч

а б

Рис. 4. Поле течения вектора скорости на высоте 250 м для момента времени 14 (*а*) и 22 ч (*б*)

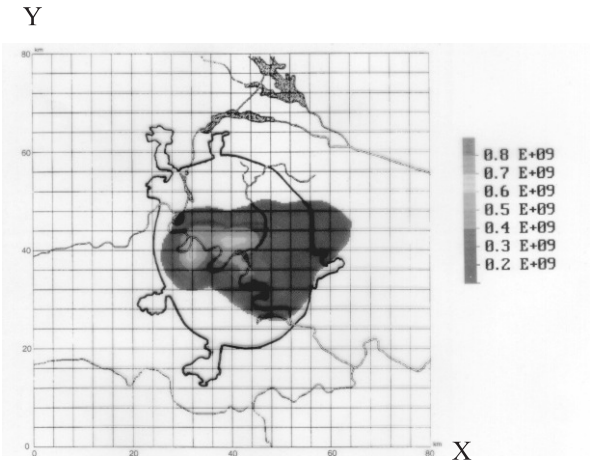


Рис. 5. Поле концентрации серной кислоты для $z = 250$ м, $t = 22$ ч

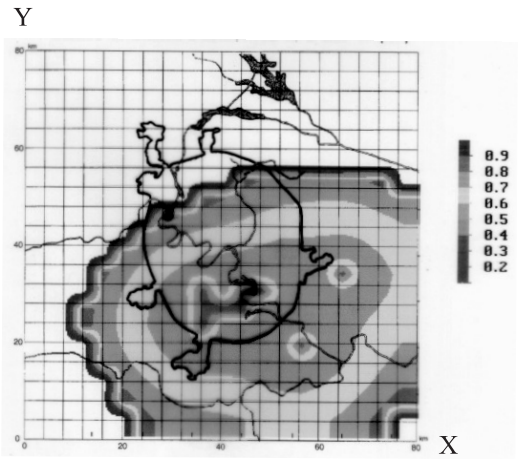


Рис. 6. Критический радиус кластера (нм) для $z = 250$ м, $t = 22$ ч

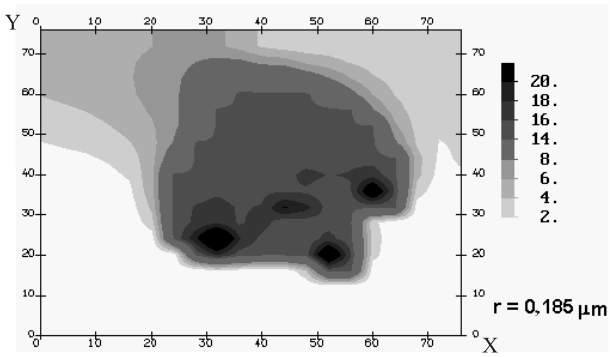


Рис. 7. Концентрация аэрозольных частиц с радиусом $r = 0,185$ μm для $z = 250$ м, $t = 48$ ч

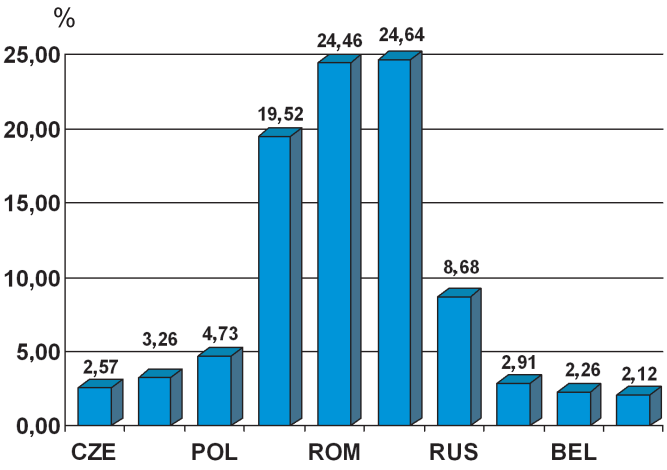


Рис. 8. Процентное соотношение вклада сопредельных государств в общее загрязнения бассейна Черного моря

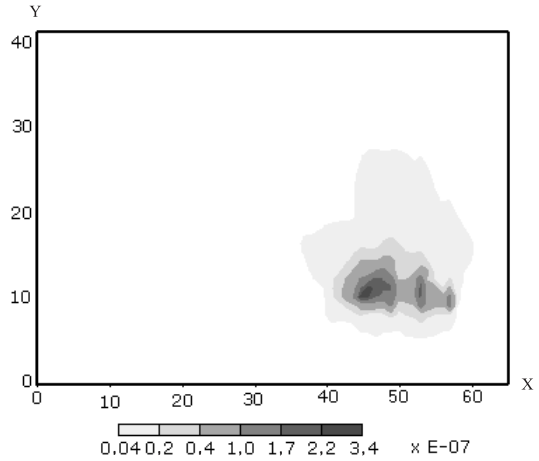


Рис. 9. Двумерные разрезы функции чувствительности бассейна Черного моря к загрязнению в плоскости (x, y) для интервала времени 60 дней

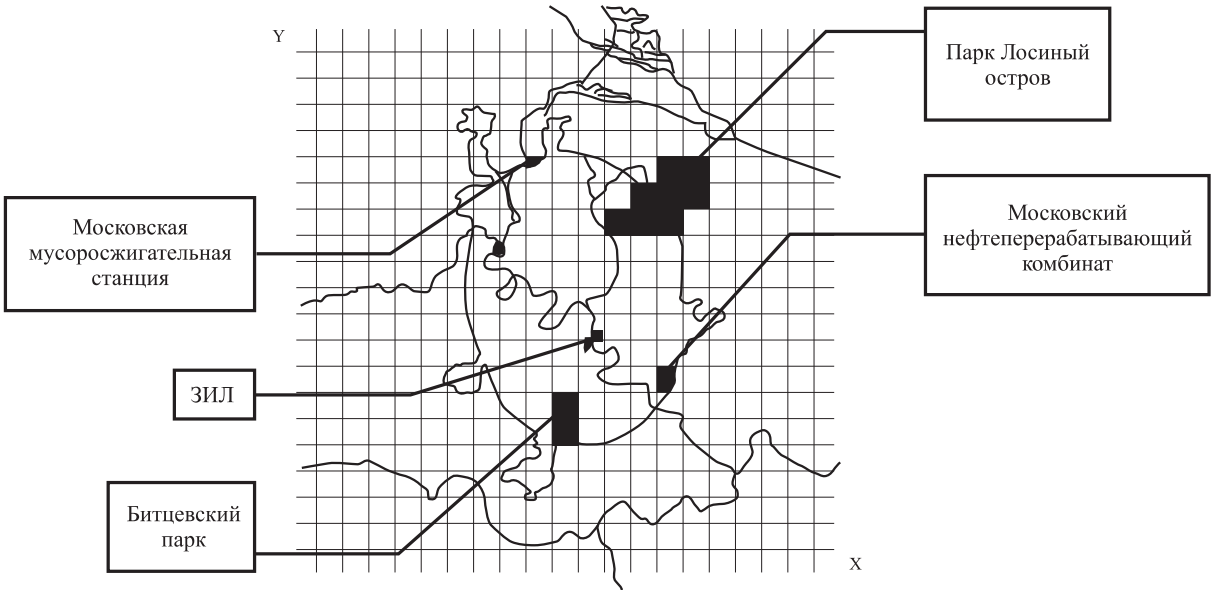


Рис. 10. Расположение источников примеси и защищаемых от загрязнения областей

ущерба в охраняемых областях необходимо регулирование источников.

Приведены данные для Битцевского парка:

Источник	Q	Q^-	Q/Q^-
Нефтеперерабатывающий завод	223,78	3 278	0,07
Мусоросжигательная станция	1167,13	3 514	0,33
ЗИЛ	195,27	3 086	0,06

Таким образом, наибольшее влияние на Битцевский парк оказывают первый и третий источники, следовательно, их мощность нужно ограничить до 10%. Второй же источник достаточно отрегулировать до 35%.

Представим аналогично расчеты для парка Лосиный остров.

Источник	Q	Q^-	Q/Q^-
Нефтеперерабатывающий завод	1446,90	3 278	0,44
Мусоросжигательная станция	418,75	3 514	0,12
ЗИЛ	471,62	3 086	0,15

Как видим, на Лосиный остров наибольшее влияние оказывает мусоросжигательная станция, чью мощность следует ограничить практически до 10% нынешней мощности. Нефтеперерабатывающий завод влияет в гораздо меньшей степени, и его мощность можно снизить только до 45%.

Заключение

В статье демонстрируются некоторые возможности математических моделей для решения задач экологического прогнозирования. Выявлены взаимосвязи между гидродинамическими, фотохимическими и кинетическими процессами аэрозолеобразования. Эти взаимосвязи дают представление об изменениях динамического, химического и аэрозольного фона в климатической системе, обусловленных влиянием антропогенных факторов. На базе математических моделей проведены численные расчеты при различных сценариях антропогенной нагрузки. Количественно и качественно проанализированы возможные механизмы вторичного загрязнения атмосферы: продукты трансформации могут оказаться более токсичными, чем первоначальные выбросы.

На базе сопряженных функций исследована функция чувствительности отдельных регионов к загрязнению, а также решена оптимизационная задача по регулированию мощности источников с целью уменьшения ущерба, наносимого окружающей среде.

Результаты численных экспериментов показывают, что только в идеализированных условиях можно фиксировать основные механизмы, ответственные за трансформацию газовых примесей и аэрозолей. На практике каждый регион характеризуется своими особенностями метеорологического режима и состава выбросов. Следовательно, в модели необходимо вводить некоторую избыточность в описании схем химических реакций и кинетических механизмов аэрозолеобразования и в возможностях перестройки самих моделей в зависимости от конкретных условий.

Литература

1. *Марчук Г. И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 319 с.
2. *Алоян А. Е., Бажин Н. М., Пененко В. В., Скубневская Г. И.* Численное моделирование фотохимического окисления метана в атмосфере промышленных регионов. Препринт 772. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1987.
3. *Aloyan A.E., Arutyunyan V. O., Marchuk G. I.* Dynamics of mesoscale boundary atmospheric layer and impurity spreading with the photochemical transformation allowed for // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 1995. Vol. 10. P. 93–114.
4. *Aloyan A. E., Marchuk G. I., Lushnikov A. A., Zagainov V. A., Makarenko S. V.* Mathematical modelling of the atmospheric aerosol transfer with coagulation taken into account // Russ. J. Num. Analys. Mathem. Modelling. 1993. Vol. 8. № 1. P. 17–30.
5. *Aloyan A. E., Egorov V. D., Marchuk G. I., Piskunov V. N.* Aerosol formation mathematical modelling with consideration for condensation kinetics // Russ. J. Num. Analys. Mathem. Modelling. 1992. Vol. 7. № 7. P. 457–471.
6. *Aloyan A. E., Arutyunyan V. O., Lushnikov A. A., Zagainov V. A.* Transport of coagulating aerosol in the atmosphere // J. Aerosol. Sci. 1997. Vol. 28. № 1. P. 67–85.

7. *Алоян А. Е.* Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. М.: ИВМ РАН, 2002.
8. *Aloyan A. E.* Numerical modeling of the interaction of gas species and aerosols in the atmospheric dispersive systems // Russ. J. Num. Analys. Mathem. Modelling. 2000. Vol. 15. № 3–4. P. 211–224.
9. *Aloyan A. E., Arutyunyan V., Haymet A. D., He J. W., Kuznetsov Y., Lubertino G.* Air quality modeling for Houston-Galveston-Brazoria area // Environment International. 2003. Vol. 29. № 2–3. P. 377–383.
10. *Алоян А. Е., Арутюнян В. О., Кузнецов Ю. А., Хи Д.* Моделирование регионального переноса газовых примесей в атмосфере с учетом фотохимической трансформации // Изв. РАН: ФАО (в печати).
11. *Kulmala M., Laaksonen A.* Pirjola Parameterization for sulfuric acid/water nucleation rates // J. Geophys. Res. 1998. № 103. P. 8301–8307.
12. *Vehkamaki H., Kulmala M., Napari I., Lehtinen KEJ., Timmreck C., Noppel M., Laaksonen A.* An improved parameterization for sulfuric acid-water nucleation rates for tropospheric and stratospheric conditions // J. Geophys. Res. 2002. № 107(D22). P. 4622.
13. *Голубев А. И., Пискунов В. Н., Повышев В. М.* Моделирование кинетических процессов объемной конденсации // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 1991. Вып. 2. С. 3–9.
14. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980. 535 с.
15. *Марчук Г. И., Алоян А. Е.* Математическое моделирование в задачах экологии. Препринт 234. М.: ОВМ АН СССР, 1989. 36 с.
16. *Марчук Г. И., Алоян А. Е.* Глобальный перенос примеси в атмосфере // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1995. Т. 31. № 5.
17. *Балацкий О. Ф.* Экономика чистого воздуха. Киев: Наукова думка, 1979.
18. *Кюнци Г. П., Крелли В.* Нелинейное программирование. М., 1965.
19. *Зельдович Я. Б.* К теории образования новой фазы. Кавитация // ЖЭТФ. 1942. Т. 12. Вып. 11. С. 525–538.

Статья поступила 14 декабря 2003 г.
Институт вычислительной математики РАН
© Марчук Г. И., Алоян А. Е., 2004