

П.К. Куценогий, А.И. Левыкин, К.К. Сабельфельд

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СУТОЧНОГО ХОДА СПЕКТРА РАЗМЕРОВ АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ

Для численного исследования динамики аэрозольной концентрации предложена математическая модель, включающая описание процессов коагуляции, разбавления и выпадения частиц. Приведены результаты расчетов среднесуточного хода параметров атмосферного аэрозоля в летнее время.

Данная работа продолжает исследования одного из авторов [1, 2] по изучению характера суточного хода концентрации и спектра размеров атмосферных аэрозолей Сибири. В [1–3] представлены результаты измерения динамики счетной концентрации и светорассеяния континентального аэрозоля в летнее время и предложен механизм формирования аэрозоля, качественно правильно описывающий особенности полученной динамики измерений. Здесь на его основе предлагается математическая модель аэрозолеобразования, включающая описание процессов коагуляции, перемешивания, разбавления мелких и выпадения крупных частиц. Детальное описание методики экспериментального измерения спектра размеров, счетной концентрации и светорассеяния изложено в [1–3, 6].

Для численного моделирования динамики образования атмосферного аэрозоля использовалась следующая система коагуляционных уравнений:

$$\frac{dN_1}{dt} = K_1(t)G - K_3(t)N_1 - N_1 \sum_{i=1}^{\infty} \beta_{1i} N_i, \quad (1)$$

$$\frac{dN_l}{dt} = -C_l(t)N_l + \frac{1}{2} \sum_{i+j=l} \beta_{ij} N_i N_j - N_l \sum_{i=1}^{\infty} \beta_{li} N_i, \quad (2)$$

где $N_l(t)$ – концентрация аэрозольных частиц, состоящих из l мономеров; β_{ij} – скорость коагуляционного слипания частиц в режиме свободномолекулярных столкновений; G , W и $K_1(t)$ – концентрация, скорость эмиссии и функция фоторазложения газовых предшественников аэрозольных частиц; $K_3(t)$ – функция разбавления мономеров аэрозольных частиц; $C_l(t)$ – функция, характеризующая скорость убывания концентрации частиц объема i в результате процессов разбавления малых ($2 \leq i \leq 50$) и выпадения крупных частиц ($i \geq 10^5$). Величина G концентрации газовых предшественников задавалась решением следующей краевой задачи:

$$\frac{dG}{dt} = W - G(K_1(t) + K_3(t)); G(0) = G(24). \quad (3)$$

Значения функций и констант фоторазложения газовых предшественников и разбавления мономеров

при расчетах суточной динамики аэрозолеобразования в летнее время задавались следующими соотношениями:

$$K_1(t) = K_{01} f(t), \quad K_{01} = 2,1 \cdot 10^{-4} s^{-1},$$

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq t \leq 6, 22 \leq t \leq 24; \\ \sin\left(\frac{\pi}{16}(t-6)\right) & \text{при } 6 \leq t \leq 22, \end{cases}$$

$$K_3(t) = K_{03} z(t), \quad K_{03} = 2,2 \cdot 10^{-4} s^{-1},$$

$$z(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq t \leq 7, 18 \leq t \leq 24; \\ \sin\left(\frac{\pi}{16}(t-6)\right) & \text{при } 7 \leq t \leq 18, \end{cases}$$

где t – время суток, ч. Значения функции разбавления l -меров $2 \leq l \leq 50$

$$C_l(t) = c_l K_3(t), \quad c_l = \frac{\log(l) - \log(50)}{\log(1) - \log(50)}$$

брались с учетом того, что источник аэрозольных частиц расположен в приповерхностном слое и, соответственно, мелкие частицы более интенсивно разбавляются за счет атмосферной конвекции. Значение константы $C_l(t) = c = 1,5/(8 \cdot 24)$ в выражении для скорости выпадения крупных частиц объема ($l \geq 10^5$) находилось из предположения о том, что их концентрация убывает при отсутствии источника примерно в три раза за восемь суток, что согласуется с экспериментально установленным средним временем жизни аэрозольных частиц в нижней тропосфере.

Численные значения констант скоростей коагуляционного слипания частиц β_{ij} взяты из работы [5]. Значение $W = 0,68 \cdot 3000 \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$ скорости эмиссии газовых предшественников находилось численно из условия сохранения суммарной массы аэрозоля от суток к суткам.

Начальный спектр размеров аэрозольных частиц аппроксимировался логнормальной функцией

$$\frac{dN(r)}{d \log r} = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi} \log \sigma} \exp\left(-\frac{\log^2 r/R}{2 \log^2 \sigma}\right)$$

с параметрами $\sigma = 1,5$; $R = 41$ нм; $N_0 = 2000$ см⁻³, что соответствует аккумуляторной моде бимодального распределения, усредненного спектра размеров субмикронной функции атмосферных аэрозолей [1–2]. Мы не включали в модель моду крупных частиц, поскольку на динамику вычисляемых ниже функционалов светорассеяния и суммарной концентрации аэрозоля она практически не влияет [3]. Поэтому в выражении для начальной функции распределения аэрозольных частиц по размерам используется только одномодальное распределение, параметры которого соответствуют параметрам аккумуляционной моды.

Для решения задачи Коши (1)–(2) применялся предложенный авторами [4] секционный конечно-элементный алгоритм, в котором для аппроксимации спектра концентрации аэрозоля использовались 50 точечных и 80 линейных конечных элементов. Детальное описание алгоритма перехода от непрерывного спектра к дискретному, процедуры интегрирования и исследование ее точности приведены там же [4]. Заметим, что в случае свободномолекулярных столкновений точность численного решения для типичных тестовых задач не хуже 10^{-4} . Полученная при аппроксимации (1)–(2) система 130 обыкновенных дифференциальных уравнений решалась до установления спектра распределения частиц от суток к суткам, что составило примерно 20 суток физического времени.

На рис. 1 показан среднесуточный ход счетной концентрации аэрозоля, который имеет выраженный максимум в дневное время между 10:00 и 14:00. Отношение максимального значения суммарной концентрации к минимальному в наших расчетах получалось в интервале $2 \div 2,5$, что качественно согласуется с измеренными данными [1–3].



Рис. 1. Установившийся среднесуточный ход счетной концентрации

Функционал $\psi(t)$ оптического светорассеяния для численно полученного спектра распределения по размерам находился из следующего выражения:

$$\psi(t) = \int \frac{dN(t)}{d \lg r} \phi(r) d \lg r,$$

где

$$\phi(r) = [1 + (r/R)^{1,5}] / [1 + (R/r)^6], \quad R = 0,16 \text{ мкм}.$$

Обоснование перехода от временного изменения счетной концентрации к временной зависимости коэффициента светорассеяния приведено в [3].

Установившаяся суточная динамика оптического светорассеяния приведена на рис. 2.



Рис. 2. Установившийся среднесуточный ход оптического рассеяния. R — отношение аэрозольного светорассеяния к молекулярному

Как видно, для данного суточного хода характерны два максимума с более выраженным вечерним максимумом между 20:00 и 24:00. Первый максимум коррелирует с максимумом счетной концентрации, связанным с ростом числа «молодых» мелких частиц, второй максимум связан с ростом в результате процесса коагуляции числа более крупных частиц, интенсивнее рассеивающих свет. Хотя абсолютное значение амплитуды колебания интенсивности светорассеяния, полученное при численном моделировании, меньше экспериментально наблюдаемого (около $10 \div 15\%$ в эксперименте и $1 \div 3\%$ в расчетах), рассчитанная величина превосходит точность численного решения. Поэтому форма теоретической зависимости не вызывает сомнения. Эта форма качественно согласуется с экспериментально наблюдаемыми закономерностями (положение максимумов и минимумов в суточной динамике).

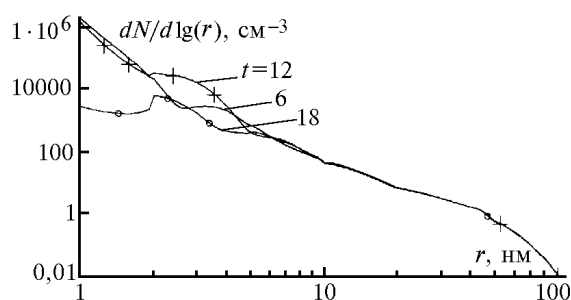


Рис. 3. Примеры установившихся спектров в различное время суток

На рис. 3 показан характер трансформации спектра размеров в разное время суток. Приведены спектры в моменты времени $t = 6, 12$ и 18 ч.

Как видно из рисунка, концентрация мелких частиц меняется в течение дня на три порядка. Для частиц размера $r > 10$ нм полученная в наших расчетах концентрация практически не менялась. Это хо-

рошо согласуется с особенностями поведения аккумуляционной фракции атмосферных аэрозолей.

1. *Koutsenogii P.K.* Measurements of remote continental aerosol in Siberia. Doktorarbeit. Johannes Gutenberg-Universitet Mainz, 1993. 105 p.
2. *Koutsenogii P.K., Jaenicke R.* // *J. Aerosol Sci.* 1994. V. 25. P. 377–383.

3. *Куценогий П.К., Буфетов Н.С., Киров Е.И., Шуцкий С.И.* // *Оптика атмосферы и океана.* 1995. Т. 9. С. 1355–1365.
4. *Koutsenogii K.P., Levykin A.I. and Sabelfeld K.K.* // *J. Aerosol Sci.* 1996. V. 27. N 5. P. 665–679.
5. *Walter H.* // *J. Aerosol Sci.* 1973. V. 4. P. 1–15.
6. *Bashurova V.S., Dreiling V., Hodzer T.V., Jaenicke R., Koutsenogii K.P., Koutsenogii P.K., Kraemer M., Makarov V.I., Obolkin V.A., Potiomkin V.L., Puser A.Y.* // *J. Aerosol Sci.* 1992. V. 23. P. 191–199.

Институт химической кинетики и горения, Новосибирск
Вычислительный центр, Новосибирск

Поступила в редакцию
29 января 1997 г.

P.K. Koutsenogii, A.I. Levykin, K.K. Sabelfeld. **Computer Modeling of Daily Evolution of Size Spectra of Atmospheric Aerosols.**

A numerical model for simulation of the dynamics of aerosol concentration which takes account of coagulation process and a selective remove of particles of different sizes is proposed. Calculations of the daily averaged curves of concentrations, size spectra and the light scattering are presented.