

Д.А. Беликов, А.В. Старченко

## Исследование образования вторичных загрязнителей (озона) в атмосфере г. Томска

*Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск  
Томский государственный университет*

Поступила в редакцию 24.01.2005 г.

Для осуществления контроля и изучения загрязнения воздуха тропосферным озоном в черте города предлагаются математические модели переноса примеси с включенными в них схемами расчета образования вторичных загрязнителей. Применяемая для этого эйлерова модель турбулентной диффузии содержит транспортное уравнение с описанием адвекции, турбулентной диффузии и химических реакций. В работе апробируются и сравниваются между собой и с данными наблюдений три упрощенных кинетических механизма образования вторичных загрязнителей. Расчет метеорологических элементов, необходимых для определения поля концентраций загрязнителей, выполняется с использованием одномерной нестационарной модели атмосферного пограничного слоя.

В качестве источников поступления первичных загрязнителей воздуха рассматриваются трубы промышленных предприятий и предприятий теплоэнергетики (точечные источники), потоки автотранспорта по сети городских автодорог (линейные источники) и предприятия с множественными выбросами вредных веществ (площадные источники).

Задача решается численно с использованием метода конечного объема для дискретизации дифференциальных уравнений.

Выбранные модели применяются для выявления особенностей загрязнения атмосферы города озоном и его предшественниками, установления факторов, влияющих на образование и разрушение загрязнителей, и для анализа динамики распределения озона в течение суток в г. Томске для различных сезонов. Результаты сравнения расчетов и измерений позволяют говорить о применимости используемых моделей, основным преимуществом которых является высокая оперативность при получении детальной картины распределения вторичных загрязнителей над районами города.

### Введение

Процессы, происходящие в нижней части атмосферы – в пограничном слое, оказывают существенное влияние на жизнь и деятельность человека [1]. При этом даже незначительные отклонения во влагообмене между атмосферой и земной поверхностью, радиационном балансе, химическом составе воздуха и других характеристиках оборачиваются серьезными последствиями для окружающей среды. По этой причине в настоящее время одной из актуальных проблем охраны окружающей среды является задача моделирования атмосферных процессов для осуществления мониторинга и прогноза экологического и метеорологического состояния пограничного слоя атмосферы, что особенно важно в условиях бурного развития промышленности, энергетики и автотранспорта, когда постоянно возрастает число факторов негативного воздействия на качество атмосферного воздуха, связанное с изменением его химического и аэрозольного состава.

В последние десятилетия математические модели широко используются для проведения сценарных расчетов, направленных на выявление характерных особенностей распространения загрязнений над выбранной территорией при различных погодных условиях [2]. Сценарный анализ выполняется

с целью изучения вклада отдельных источников в общий баланс загрязнения атмосферы [3], а также для оценки последствий возможных аварийных ситуаций на объектах повышенной опасности [4]. Кроме того, математические модели включаются в оперативные системы контроля и анализа качества воздуха, которые, работая в «реальном времени» и используя данные наблюдений, периодически проводимых на стационарных постах, обеспечивают высокую скорость получения детальных распределений концентраций загрязнений над городскими кварталами вне зоны охвата постами наблюдений при высокой достоверности результатов, обеспеченной измерениями [5, 6].

Анализ состояния загрязненности воздуха не будет полным без учета влияния продуктов вторичной эмиссии – веществ, образующихся в атмосфере в результате химических и фотохимических реакций между продуктами антропогенных выбросов и компонентами воздуха. Данный класс соединений, многие из которых характеризуются высокой токсичностью, образует так называемый городской фотохимический смог, характеризующийся ослаблением видимости и вредным влиянием на человека, животных и растения [7].

Для расчета концентраций вторичных загрязнителей используются модели переноса примеси

с интегрированными в них блоками (схемами) химических реакций, которые основаны на уравнениях химической кинетики. В настоящее время разработано большое количество моделей, способных оценивать концентрации вторичных загрязнителей, при этом точность анализа во многом зависит от количества учитываемых компонент и связывающих их уравнений, которые в различных схемах варьируются в пределах от десяти до нескольких сотен [2, 8–12].

Цель данной работы состоит в сравнении трех сокращенных кинетических схем генерации озона и изучении возможности их применения к исследованию образования вторичных загрязнителей в г. Томске и его окрестностях. Предполагается при помощи разработанных моделей выявить особенности загрязнения городского воздуха озоном, установить факторы, влияющие на образование и разрушение вторичных загрязнителей, изучить динамику их изменения в течение суток для различных сезонов.

### Модель переноса примеси с учетом химических взаимодействий

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 [13]:

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

где  $C_i(t, x, y, z)$  — концентрация  $i$ -й компоненты 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 по времени.

Метод расчета компонент скорости ветра  $U, V, W$  и турбулентных корреляций концентрации с компонентами скорости ветра  $\langle c_i u \rangle, \langle c_i v \rangle, \langle c_i w \rangle$ , входящими в уравнение (1), а также применяемые для этого модели атмосферного пограничного слоя и турбулентности подробно описаны в [14].

Моделирование газофазной фотохимии осуществляется на основе трех упрощенных схем — полуэмпирической кинетической схемы Аззи, используемой в модели Харли [9], фотохимического модуля AIRCHEM [10], сокращенного кинетического механизма RADM [11].

Схема Аззи опирается на полуэмпирический механизм GRS (Generic Reaction Set), содержащий 11 химических компонентов (реагирующая часть

смога  $R_{smog}$ , органические радикалы  $RP$ , перекись водорода  $H_2O_2$ , оксид азота  $NO$ , диоксид азота  $NO_2$ , озон  $O_3$ , диоксид серы  $SO_2$ , устойчивые газообразные органические соединения углерода SNGOC, устойчивые газообразные соединения азота SGN, устойчивые не газообразные соединения азота SNGN, устойчивые не газообразные соединения серы SNGN), участвующих в 8 химических реакциях (табл. 1).

Таблица 1

Реакции и скорости реакций фотохимической схемы Аззи

Реакция	Скорость реакции
$R_{smog} + hv \rightarrow RP + R_{smog} + \eta SNGOC$	$R_1 = k_1 C_{R_{smog}}$
$RP + NO \rightarrow NO_2$	$R_2 = k_2 C_{RP} C_{NO}$
$NO_2 + hv \rightarrow NO + O_3$	$R_3 = k_3 C_{NO_2}$
$NO + O_3 \rightarrow NO_2$	$R_4 = k_4 C_{NO} C_{O_3}$
$RP + RP \rightarrow RP + \alpha H_2O_2$	$R_5 = k_5 C_{RP} C_{RP}$
$RP + NO_2 \rightarrow SGN$	$R_6 = k_6 C_{RP} C_{NO_2}$
$RP + NO_2 \rightarrow SNGN$	$R_7 = k_7 C_{RP} C_{NO_2}$
$RP + SO_2 \rightarrow SNGN$	$R_8 = k_8 C_{RP} C_{SO_2}$

Данная схема, дополненная вододофазными реакциями для диоксида серы и аэрозолей, включена в трехмерную, негидростатическую модель TAMP (The Air Pollution Model) [9] с вертикальной координатой, учитывающей рельеф поверхности. Модель TAMP представляет собой программный комплекс, нацеленный на изучение мезомасштабной метеорологии, а также переноса и трансформации загрязнителей. Вблизи точечного источника для более аккуратного представления рассеяния примеси используется лагранжева модель (Lagrangian Particle Module), учет эффекта плавучести осуществляется при помощи модели подъема факела (Plum Rise Model), а эйлерова модель (Eulerian Grid Model) решает прогностическое уравнение переноса с учетом эффектов влажного и сухого осаждения.

Модуль AIRCHEM [10] представляет собой блок химических реакций сдвоенной HIRES-AIRCHEM системы, применяемой для исследования проблем как локального, так и регионального образования вторичных загрязнителей. В используемой версии содержится 10 компонентов (озон  $O_3$ , оксид азота  $NO$ , диоксид азота  $NO_2$ , альдегиды  $ALD$ , гидроксильный радикал  $OH$ , углеводородные радикалы  $RO_2$ , углеводородные соединения  $CH$ , перекисный радикал  $HO_2$ , оксид углерода  $CO$ , атомарный кислород  $O$ ), которые участвуют в 10 реакциях (табл. 2).

В [10] при помощи HIRES-AIRCHEM были изучены три проблемы разного масштаба. Первая, локальная, ориентирована на исследование загрязнения озона воздушного бассейна г. Сидней, вторая, комбинированная, объединяющая локальную и региональную задачи, направлена на изучение прохождения дымового шлейфа лесного пожара, удаленного на расстояние более 100 км через атмосферу Сидней. И третья — проблема дальнего пе-

реноса дыма в юго-восточной Азии от пожаров в лесах Индонезии.

Т а б л и ц а 2

**Реакции и скорости реакций фотохимического модуля AIRCHEM**

Реакция	Скорость реакции
$RH + OH \rightarrow 4RO_2 + 2ALD$	$R_1 = k_1 C_{RH} C_{OH}$
$ALD + hv \rightarrow 2HO_2 + CO$	$R_2 = k_2 C_{ALD}$
$RO_2 + NO \rightarrow NO_2 + ALD + HO_2$	$R_3 = k_3 C_{RO_2} C_{NO}$
$HO_2 + NO \rightarrow NO_2 + OH$	$R_4 = k_4 C_{HO_2} C_{NO}$
$NO_2 + hv \rightarrow NO + O_3$	$R_5 = k_5 C_{NO_2}$
$NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$	$R_6 = k_6 C_{NO} C_{O_3}$
$O_3 + hv \rightarrow O_2 + O(^1D)$	$R_7 = k_7 C_{O_3}$
$O(^1D) + H_2O \rightarrow 2OH$	$R_8 = k_8 C_{O(^1D)} C_{H_2O}$
$NO_2 + OH \rightarrow HNO_3$	$R_9 = k_9 C_{NO_2} C_{OH}$
$CO + OH \rightarrow CO_2 + HO_2$	$R_{10} = k_{10} C_{CO} C_{OH}$

Сокращенный кинетический механизм RADM, приведенный в работе [11], включает 11 компонентов (озон  $O_3$ , оксид азота  $NO$ , диоксид азота  $NO_2$ , атомарный кислород  $O$ , углеводородные соединения  $RH$ , гидроксильный радикал  $OH$ , углеводородные радикалы  $RO_2$ , альдегиды  $RCHO$ , анионы органических кислот  $RC(O)O_2$ , перекисный радикал  $HO_2$ , перацетилнитрат (ПАН)  $RC(O)O_2NO_2$ , взаимодействующих между собой в 12 реакциях (табл. 3).

Т а б л и ц а 3

**Реакции и скорости реакций фотохимической схемы сокращенного кинетического механизма RADM**

Реакция	Скорость реакции
$NO_2 + hv \rightarrow NO + O$	$R_1 = k_1 C_{NO_2}$
$O + O_2 \rightarrow O_3$	$R_2 = k_2 C_O$
$NO + O_3 \rightarrow NO_2$	$R_3 = k_3 C_{NO} C_{O_3}$
$RH + OH \rightarrow RO_2$	$R_4 = k_4 C_{RH} C_{OH}$
$RCHO + OH \rightarrow RC(O)O_2$	$R_5 = k_5 C_{RCHO} C_{OH}$
$RCHO + hv \rightarrow RO_2 + HO_2$	$R_6 = k_6 C_{RCHO}$
$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	$R_7 = k_7 C_{NO} C_{HO_2}$
$RO_2 + NO \rightarrow NO_2 + HO_2 + RCHO$	$R_8 = k_8 C_{RO_2} C_{NO}$
$RC(O)O_2 + NO \rightarrow NO_2 + RO_2$	$R_9 = k_9 C_{RCOO_2} C_{NO}$
$NO_2 + OH \rightarrow NO + H_2O$	$R_{10} = k_{10} C_{NO_2} C_{OH}$
$RC(O)O_2 + NO_2 \rightarrow RC(O)O_2NO_2$	$R_{11} = k_{11} C_{RCOO_2} C_{NO_2}$
$RC(O)O_2NO_2 \rightarrow RC(O)O_2 + NO_2$	$R_{12} = k_{12} C_{RCOO_2NO_2}$

Математическая модель переноса примеси [11], включающая процессы диффузии и адвекции, сухого осаждения и химические реакции сокращенного кинетического механизма RADM, применялась для исследования пространственно-временного распределения приземных концентраций озона в зависимости от режима эмиссии и метеоусловий, а также для анализа загрязнения воздуха в г. Сан Хуан (Аргентина).

Кроме представленных компонентов в моделях, использующих кинетическую схему Аззи и сокращенный кинетический механизм RADM, было

добавлено еще одно соединение – оксид углерода, который в рассматриваемых кинетических схемах принимается химически инертным (устойчивым). Такое дополнение связано с тем, что апробация выбранных математических моделей переноса и трансформации примеси производилась на основе данных ТОР-станции ИОА СО РАН, на которой выполняются регулярные измерения лишь некоторых малых составляющих приземного слоя атмосферы, в том числе и оксида углерода. Поэтому данный компонент примеси может рассматриваться как критерий оценки адекватности представления численной модели переноса примеси за счет адвекции и турбулентной диффузии.

**Начальные и граничные условия**

В качестве граничных условий для концентраций на входных боковых границах используются фоновые значения, определяемые на каждом шаге предварительным расчетом при помощи боксовой модели (расчет в одной ячейке) без учета переноса и турбулентной диффузии на основании только лишь химических реакций. Начальные фоновые значения для озона, оксида углерода, оксида и диоксида азота выбирались по данным измерений ТОР-станции Института оптики атмосферы СО РАН.

Так как наблюдения проводятся в области, расположенной на восточной окраине города (рис. 1), то в качестве начальных фоновых значений можно принять концентрации  $O_3$ ,  $NO$  и  $NO_2$ , фиксируемые в ночное время при направлении ветра от северо-восточного до юго-восточного, поскольку в этом случае набегающий поток приходит с территорий, практически не подверженных антропогенной нагрузке. Фоновое значение для углеводородов принималось равным 0,2 ppb [2]. Для остальных компонентов задавались нулевые начальные и фоновые значения вследствие отсутствия каких-либо данных наблюдений.

При инициализации модели считаем, что во всей расчетной области концентрации рассматриваемых компонентов примеси равны начальным фоновым.

На верхней границе ставятся простые градиентные условия. На нижней границе используются граничные условия, моделирующие сухое осаждение компонентов примеси [15]:

$$-\langle c_i \bar{w} \rangle = v d_i C_i, \quad (2)$$

$$v d_i = \frac{1}{r_a + r_b + r_c}, \quad r_a = \frac{\Psi(z/z_{0t}, z/L)}{\kappa u_*},$$

$$r_b = \frac{2(Sc_i/0,72)^{2/3}}{\kappa u_*}, \quad r_c = 60,0 \text{ с/м};$$

$$\Psi(z/z_{0t}, z/L) = \begin{cases} \ln(z_{0t}/L) - 2 \ln \left( \frac{1 + \sqrt{1 - 9z/z_{0t}}}{1 + \sqrt{1 - 9z/L}} \right), & z/L \leq 0, \\ \ln(z/z_{0t}) + 6,34 \left( \frac{z}{L} - \frac{z_{0t}}{L} \right), & z/L > 0, \end{cases}$$

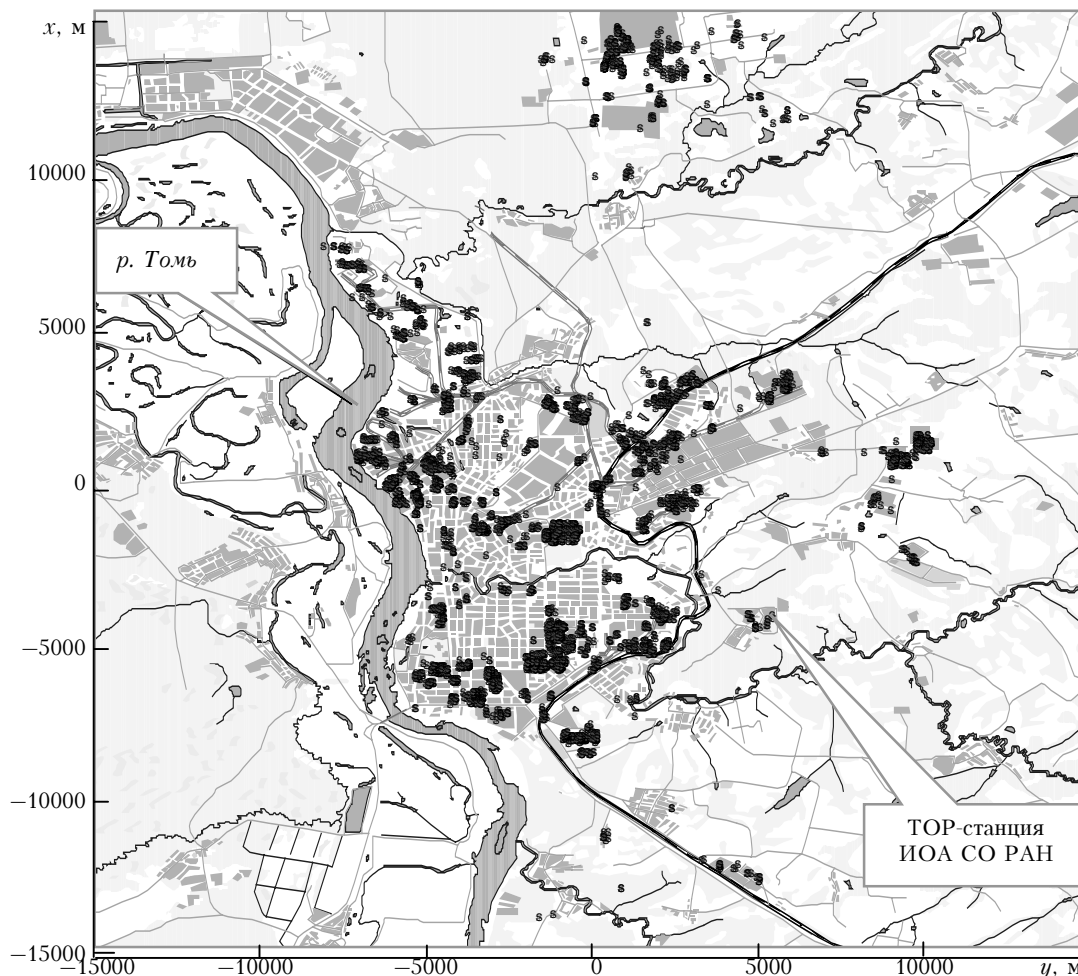


Рис. 1. Область исследования и распределение стационарных источников загрязнения атмосферы (отмечены черным) в Томске и его окрестностях

где  $vd_i$  – скорость осаждения  $i$ -го компонента примеси;  $r_a$  – аэродинамическое сопротивление турбулентной атмосферы;  $r_b$  – поверхностное сопротивление элементов шероховатости;  $r_c$  – сопротивление, обусловленное растительностью;  $z$  – высота;  $z_{0t}$  – термическая высота шероховатости;  $L$  – масштаб Обухова;  $Sc_i$  – число Шмидта для  $i$ -го компонента примеси;  $\kappa = 0,40$  – постоянная фон Кармана;  $u_*$  – динамическая скорость.

### Метод расчета

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 рассчитываются по модели атмосферного пограничного слоя, подробно описанной в [14].

Аппроксимация дифференциальных операторов в (1) осуществлена со вторым порядком точности по координатам и первым – по времени с использованием явных разностных схем для всех членов уравнения за исключением вертикальной диффузии.

Такой способ дискретизации дифференциальной задачи позволяет решить проблемы, возникающие из-за нелинейности уравнения (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 монотонизирующей противопотоковой схемы Ван Лира, не допускающей появления «нефизических» значений концентрации.

Учет протекания химических реакций, приводящих к появлению вторичных загрязнителей воздушного бассейна, значительно увеличивает время вычислений, поэтому для расчетов использовались высокопроизводительные вычислительные ресурсы – многопроцессорные кластерные системы ИОА СО РАН (<http://cluster.iao.ru>) и ТГУ (<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 параллельно

лепипед 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  $(C_i)_{k,l,m}^{n+1}$  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 два сеточных значения концентрации из соседней подобласти. Поэтому для корректной работы параллельной программы необходимо организовать межпроцессорные обмены приграничных сеточных значений. Это было выполнено с использованием функций библиотеки передачи сообщений MPI\_SendRecv. Кроме того, при подготовке проведения параллельных расчетов применялись следующие функции библиотеки Message Passing Interface: MPI\_Bcast и MPI\_Scatter.

### Условия проведения расчетов и обсуждение результатов

Представленные модели переноса и химической трансформации примеси применялись для анализа загрязнения атмосферы г. Томска продуктами вторичной эмиссии в различные сезоны. Основное внимание уделяется исследованию образования приземного озона как одного из наиболее распространенных вторичных загрязнителей и в то же время чрезвычайно опасного вещества. Для оценки достоверности результатов расчета использовались данные наблюдений за изменением метеорологических параметров (температура и влажность воздуха, солнечная радиация, направление и скорость ветра), а также измеренные значения концентрации озона, оксида и диоксида азота, полученные на ТОР-станции Института оптики атмосферы СО РАН, расположенной в пригороде к востоку от г. Томска (см. рис. 1).

В расчетной области, которая представляет собой параллелепипед высотой 2 км с горизонтальными размерами  $30 \times 30$  км, в центре которого располагается г. Томск (см. рис. 1), строится сетка  $100 \times 100 \times 100$  узлов, равномерная по горизонтали и неоднородная, сгущающаяся к поверхности в вертикальном направлении. В расчетах рассматриваются 119 линейных, 12 площадных и 338 точечных источников. Предполагается, что интенсивность поступления примеси от автомобилей изменяется

в течение суток согласно графику, представленному на рис. 2 [16]. А в совокупном объеме оксидов азота, поступающих в атмосферу с автомобильными выхлопами, содержится 75% монооксида азота и 25% диоксида [16].

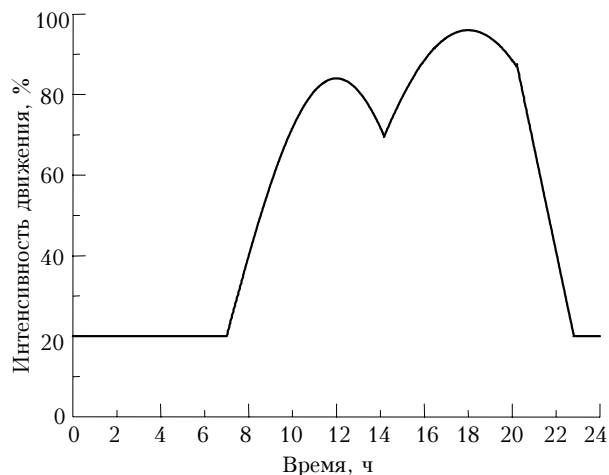


Рис. 2. Временная зависимость интенсивности движения автомобильного транспорта [16]

На рис. 3 представлены результаты расчетов и данные наблюдений для условий 19–20 февраля 2004 г., 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.

Данный факт обусловлен тем, что в дневное время значительной становится фотохимическая реакция фотолиза молекулы  $\text{NO}_2$ , скорость которой превосходит скорость обратной реакции  $\text{O}_3 + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$ . Такая ситуация приводит к снижению концентрации диоксида азота, поскольку уровень его эмиссии в пригороде невысок.

Следует отметить, что в рассмотренных кинетических схемах генерации озона наряду с реакцией фотолиза  $\text{NO}_2$ , в результате которой образуются две активные частицы ( $\text{NO}$  и  $\text{O}$ ), рассматриваются также фотохимические реакции разложения летучих соединений антропогенных выбросов с появлением радикалов, которые, взаимодействуя с  $\text{NO}$ , приводят к образованию диоксида азота. Однако в данном случае (рис. 3) направление ветра было таково, что область, для которой были проведены измерения и расчеты, находилась в наветренной части пригорода, где влияние городских источников загрязнения атмосферного воздуха было несущественным.

В ночное время фотохимические реакции отсутствуют, поэтому происходит окисление  $\text{NO}$  до  $\text{NO}_2$ , сопровождаемое уменьшением концентрации  $\text{O}_3$ . Таким образом, временные зависимости изменения приземной концентрации оксида азота и озона в течение суток подобны.

Представленные на рис. 4 рассчитанные значения приземных концентраций компонентов примеси и метеорологических параметров, а также данные наблюдений для условий 15–16 октября 2003 г. качественно аналогичны результатам, полученным для 19–20 февраля 2004 г.

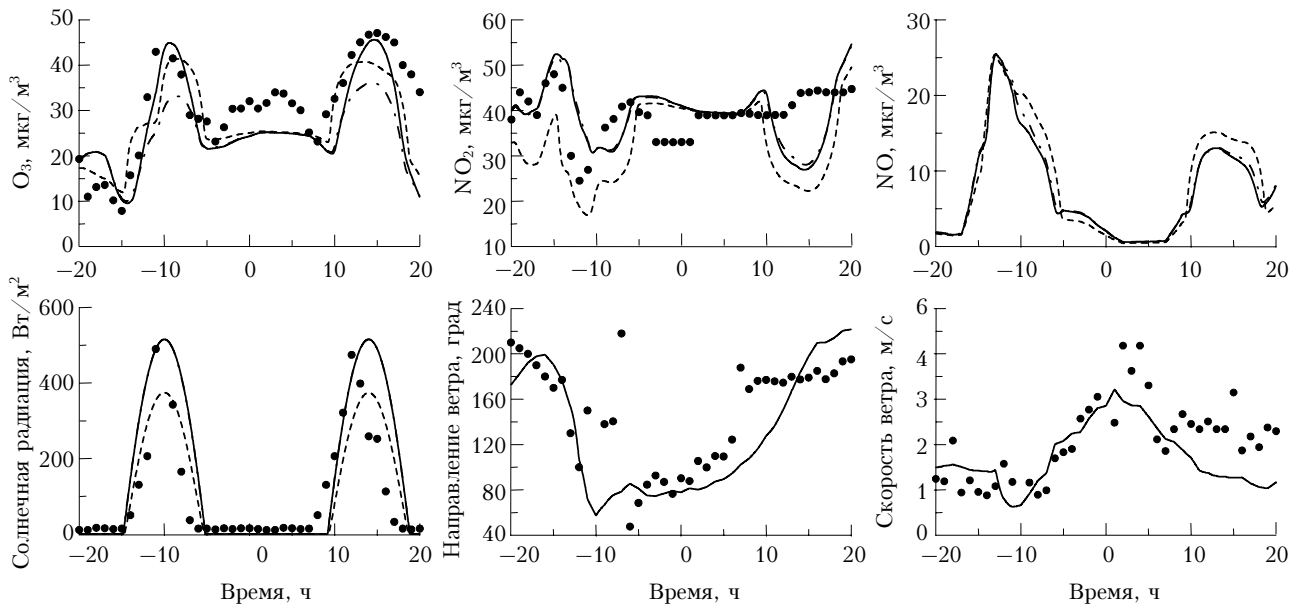


Рис. 3. Сравнения результатов расчетов по различным моделям с данными наблюдений по концентрациям озона, диоксида и оксида азота, суммарной солнечной радиации, направлению и скорости ветра для условий 19–20 февраля 2004 г. Отрицательная часть временной оси соответствует первым суткам моделирования, положительная – вторым. Символы представляют измеренные значения, кривые – расчет (сплошная черная линия – сокращенный механизм RADM, штрих-пунктирная – механизм AIRCHEM, штриховая – модель GRS). В расчетах использованы начальные фоновые значения:  $O_3$  – 29 мкг/м<sup>3</sup>,  $NO_2$  – 28 мкг/м<sup>3</sup>,  $NO$  – 4,3 мкг/м<sup>3</sup>,  $CO$  – 0,1 мг/м<sup>3</sup>

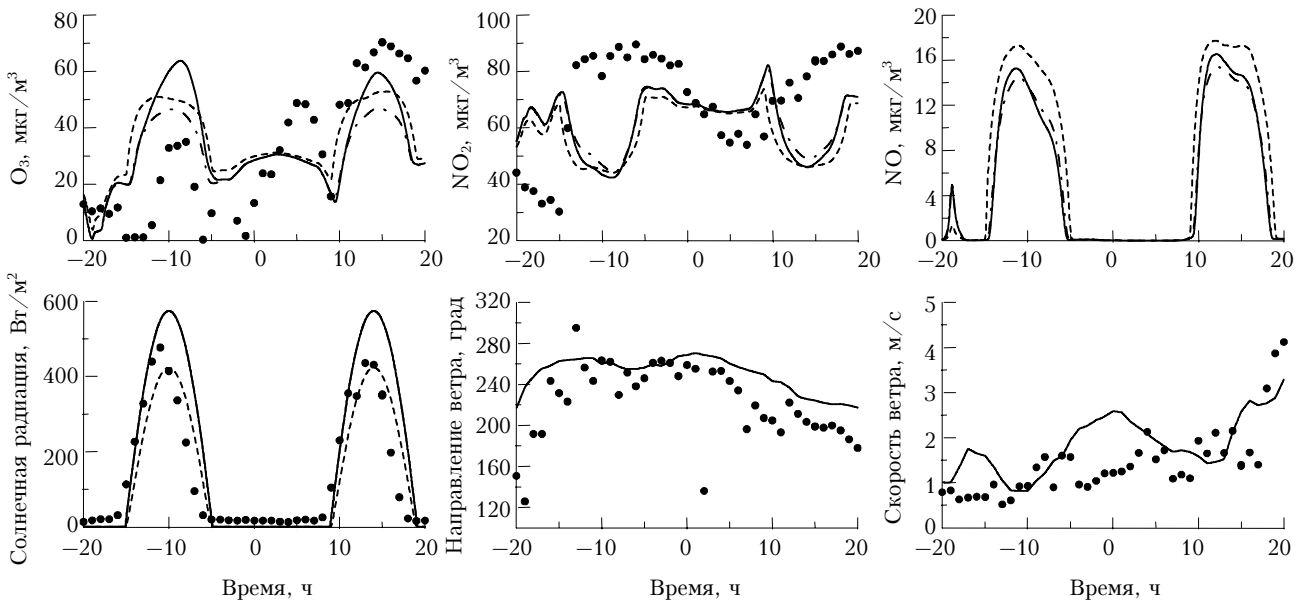


Рис. 4. Сравнения результатов расчетов по различным моделям с данными наблюдений по концентрациям озона, диоксида и оксида азота, суммарной солнечной радиации, направлению и скорости ветра для условий 15–16 октября 2003 г. В расчетах использованы начальные фоновые значения:  $O_3$  – 39 мкг/м<sup>3</sup>,  $NO_2$  – 56 мкг/м<sup>3</sup>,  $NO$  – 4,3 мкг/м<sup>3</sup>,  $CO$  – 0,1 мг/м<sup>3</sup>. Обозначения см. рис. 3

Более высокие значения приземной концентрации озона и  $NO_2$  (по сравнению с приведенной на рис. 3) при близком уровне солнечной радиации обусловлены, прежде всего, тем, что в рассматриваемый период времени наблюдался западный и юго-западный (220–280°) ветер, при котором выбросы от источников, расположенных в черте города, сносятся на пункт наблюдения (ТОР-станцию). В этом случае существенную роль начинает играть

генерация «вторичного» диоксида азота за счет химической реакции радикалов с монооксидом азота (уменьшение концентрации  $NO$  на рис. 4 по сравнению с приведенной на рис. 3), фотолиз которого способствует повышению приземной концентрации озона. Кроме того, рост концентрации озона обуславливается еще и тем, что скорость ветра вблизи поверхности 15–16 октября 2003 г. была ниже, чем 19–20 февраля 2004 г. (см. рис. 3, 4).

На рис. 5 приведено сравнение расчетов, выполненных с использованием выбранных сокращенных кинетических схем образования озона, с данными наблюдений для 26–27 мая 2004 г.

Видно, что имеет место хорошее соответствие предсказанных и измеренных значений приземной концентрации озона, диоксида азота, монооксида углерода, а также метеорологических параметров. Так как уровень солнечной радиации для данного случая выше, чем для рассмотренных ранее периодов моделирования, то и расчеты, и измерения фиксируют более высокие значения приземной концентрации озона в дневное время суток.

Явная зависимость от уровня солнечной радиации прослеживается и для других малых составляющих: гидроксильной группы (ОН), пероксидной группы ( $\text{HO}_2$ ) и углеводородных радикалов, что обусловлено фотохимической реакцией разложения летучих компонентов выбросов автотранспорта и промышленных предприятий города.

Характерные ночные максимумы и дневные минимумы концентрации оксида углерода (рис. 5), 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 ее накоплению вблизи поверхности. Утреннее разрушение инверсии за счет солнечной радиации и прогрева земной поверхности, наоборот, интенсифицирует обменные процессы между нижними и верхними слоями, следовательно, способствует рассеянию примеси.

Таким образом, соответствие расчетных профилей концентраций  $\text{O}_3$  измеренным данным позволяет утверждать о допустимости применения данных моделей к изучению 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.

Для изучения суточной динамики распределения приземной концентрации озона в исследуемой области была выбрана одна из трех рассматриваемых моделей, а именно построенная на основе GRS-схемы Аззи [9].

Как отмечалось выше, доминирующее влияние на скорость образования озона играет уровень солнечной радиации, что проявляется в суточном изменении его концентрации. Другими важными факторами являются расположение источников выбросов, а также направление и скорость ветра. На рис. 6,7 представлены изолинии приземной концентрации озона на высоте 10 м на 12 и 20 ч 20 февраля 2004 г.

В дневные часы (см. рис. 6), когда солнечная радиация наиболее интенсивна, минимальные значения приземной концентрации озона наблюдаются в черте города вследствие высокого уровня монооксида азота, выбрасываемого автотранспортом и промышленными предприятиями. Ветер в данный момент времени имеет юго-восточное направление, поэтому область наибольших концентраций  $\text{O}_3$  расположена у северо-западной окраины города, что обусловлено выносом примеси из города и созданием тем самым благоприятных условий для генерации озона за счет фотолиза  $\text{NO}_2$ . Кроме того, в этом районе расположены промышленные предприятия, выбрасывающие летучие углеводородные соединения, присутствие которых, как отмечено выше, повышает скорость образования приземного озона. Таким образом, за городом образуется протяженный шлейф с повышенной концентрацией озона.

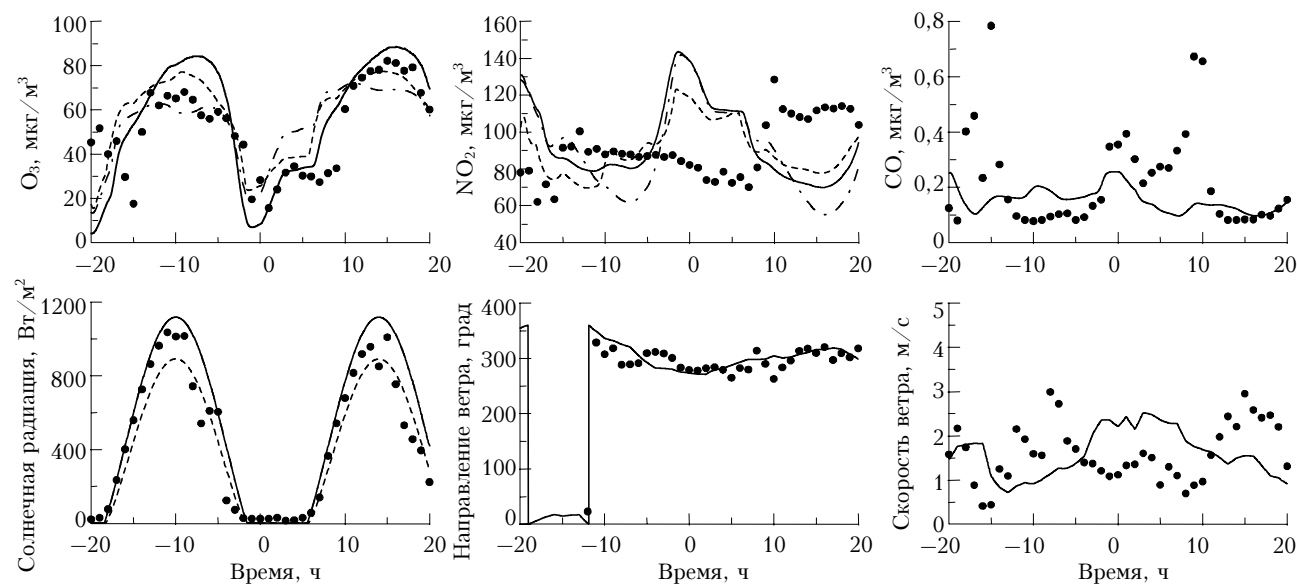
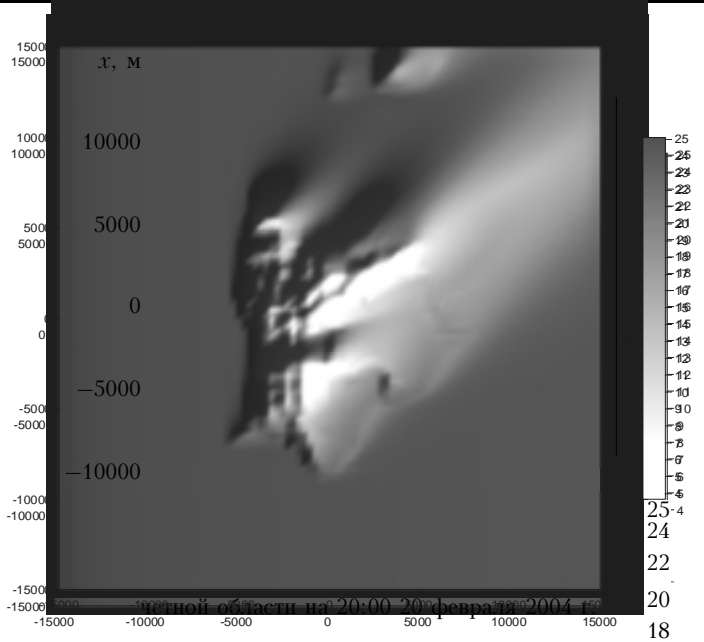
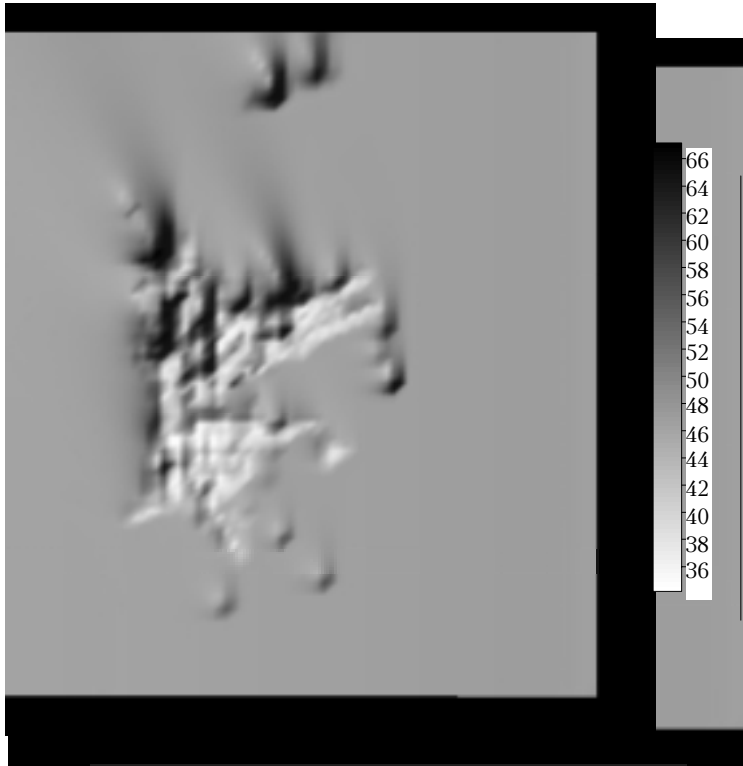


Рис. 5. Сравнения результатов расчетов по различным моделям с данными наблюдений по концентрациям озона, диоксида азота и оксида углерода, суммарной солнечной радиации, направлению и скорости ветра для условий 26–27 мая 2004 г. В расчетах использованы начальные фоновые значения:  $\text{O}_3$  — 49  $\text{мкг}/\text{м}^3$ ,  $\text{NO}_2$  — 93,5  $\text{мкг}/\text{м}^3$ ,  $\text{NO}$  — 4,3  $\text{мкг}/\text{м}^3$ ,  $\text{CO}$  — 0,1  $\text{мг}/\text{м}^3$ . Обозначения см. рис. 3



После захода солнца (см. рис. 7) фотохимические реакции прекращаются. Выбросы оксида азота приводят к почти полному разрушению озона в черте города и за городом с подветренной стороны. Поэтому наибольшие концентрации озона к этому времени сохраняются с наветренной стороны города, где несущественно влияние антропогенных источников.

Таким образом, результаты расчетов показывают, что в дневное время наибольшие приземные концентрации озона наблюдаются за городом с подветренной стороны, что согласуется с исследованиями [16]. После захода солнца – с наветренной, где не отмечается влияние города, обусловленное выбросами монооксида азота.

## Оценка ускорения

Для рассмотренных выше условий на кластере Института оптики атмосферы СО РАН была проведена оценка ускорения параллельного алгоритма в отношении к последовательному. На рис. 8 представлена зависимость ускорения от числа используемых процессоров.

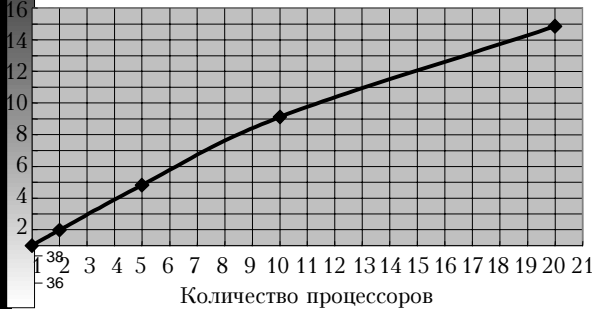


Рис. 8. Ускорение параллельной программы

Видно, что для небольшого количества процессоров, применяемых при расчетах, наблюдается практически линейный рост производительности, при этом на 10 узлах достигается 9-кратное ускорение, тогда как на 20 – лишь 15-кратное, что связано с ростом затрат на межпроцессорные обмены. Таким образом, использование более 10 процессоров менее эффективно. Однако полученное падение производительности вычислительной программы является незначительным, что говорит о хорошей степени параллелизма алгоритма и удачном планировании обменов между процессами.

## Заключение

Представлены результаты сравнения трех сокращенных кинетических механизмов образования озона. Получено хорошее согласование между расчетными значениями приземной концентрации загрязняющих атмосферу веществ, скорости и направления ветра и данными наблюдений, которое свидетельствует о возможности применения рассмотренных моделей для изучения образования, трансформации и рассеяния озона в черте города и его окрестностях.

На основе выбранных моделей выявлены особенности загрязнения атмосферы города озоном и его предшественниками, установлены факторы, влияющие на образование и разрушение вторичных загрязнителей, исследовано пространственное распределение приземной концентрации озона в течение 1 сут. Данные модели могут быть использованы при оперативном прогнозе качества городского воздуха, поскольку их применение обеспечивает высокую скорость получения результатов с хорошей точностью предсказания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 04-07-90219, и Федерального агентства по образованию, грант № А04-2.10-770.

1. Оке Т.Р. Климаты пограничного слоя. Л.: Гидрометеоздат, 1982. 360 с.



2. Moussiopoulos N., Sahn P., Kessler C. Numerical simulation of photochemical smog formation in Athens, Greece — A case study // *Atmos. Environ.* 1995. V. 29. N 24. P. 3619–3632.
3. Старченко А.В., Беликов Д.А., Есаулов А.О. Численное моделирование влияния метеорологических параметров на качество атмосферного воздуха в городе // *Тр. конф. ENVIROMIS 2002*. Томск: Изд-во ГУ «Томский ЦНТИ», 2002. С. 142–151.
4. Пененко В.В., Коротков М.Г. Применение численных моделей для прогнозирования аварийных и экологических ситуаций в атмосфере // *Оптика атмосф. и океана*. 1998. Т. 11. № 6. С. 567–572.
5. EURAD: <http://www.eurad.uni-koeln.de>
6. ADMS-Urban: <http://www.cerc.co.uk/software/urban.htm>
7. Мак-Ивен М., Филлнс Л. Химия атмосферы. М.: Мир, 1978. 375 с.
8. Stockwell W.R., Kirchner F., Kuhn M., Seefeld S. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling // *J. Geophys. Res. D*. 1997. V. 102. N 22. P. 25847–25879.
9. 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.
10. Morison R.P., Leslie L.M., Speer M.S. Atmospheric modeling of air pollution as a tool for environmental prediction management // *Meteorol. and Atmos. Phys.* 2002. V. 80. N 1–4. P. 141–151.
11. Короленок Е.В., Нагорнов О.В. Моделирование приземных концентраций озона городского региона // *Мат. моделир.* 2002. Т. 14. № 4. С. 80–94.
12. Seinfeld J.H. Atmospheric chemistry and physics of air pollution. N.Y.: Wiley, 1986. 738 с.
13. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1975. 448 с.
14. Старченко А.В., Беликов Д.А. Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха // *Оптика атмосф. и океана*. 2003. Т. 16. № 7. С. 657–665.
15. Perego S. Metphomod — a Numerical Mesoscale Model for Simulation of Regional Photosmog in Complex Terrain: Model Description and Application during Pollu-met 1993 (Switzerland) // *Meteorol. and Atmos. Phys.* 1999. V. 70. N 1–2. P. 43–69.
16. Tulet P., Maaley A., Crassier V., Rosset R. An episode of photooxidant plume pollution over the Paris region // *Atmos. Environ.* 1999. V. 33. N 11. P. 1651–1662.

*D.A. Belikov and A.V. Starchenko. Investigation of secondary pollutant formation (ozone) in the atmosphere of Tomsk.*

To monitor and study of the urban air pollution by troposphere ozone, prognostic models of spreading pollution taking into account schemes of secondary pollutant formation are proposed. Eulerian model of turbulent diffusion containing transport equation with description of advection, turbulent diffusion, and chemical reaction is used. In this work, three reduced kinetic mechanisms of secondary pollutant formation are approved and compared with observed data. A short-term forecast of the urban weather is realized with the use of a one-dimensional unsteady model of atmospheric boundary layer.

The following sources of primary pollution are considered industrial and heat powder stacks (point sources), vehicle emissions (linear sources) and large industrial area (area sources).

The mathematical problem is solved with usage of a finite volume method.

One of proposed models was applied to reveal the features of the urban air pollution by ozone and its precursors, to determine factors of pollution generation and destruction, to analyse the dynamics of ozone 24 hours' distribution for various seasons.

Results of comparison of predictions and observations allow one to apply used models, whose main advantage is high performance in forecasting of secondary air pollution distribution above urban regions.