

ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ
ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

УДК 551.51

**Задача о пассивной локации атмосферы
ветровыми потоками для оценки полей концентрации
и определения источников примеси**

В.А. Поддубный¹, Е.С. Дубинкина^{1,2*}

¹Институт промышленной экологии УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 20

²Дальневосточный федеральный университет
690000, г. Владивосток, ул. Суханова, 8

Поступила в редакцию 28.03.2017 г.

Представлена принципиально новая физико-математическая постановка задачи восстановления среднего поля концентрации атмосферной примеси и определения источников эмиссии по данным локальных измерений — задача о пассивной локации атмосферы ветровыми потоками. Даются определения новых функций: среднего эффективного поля концентрации и среднего эффективного поля источников. Получены дифференциальная и интегральная формы уравнений для решения поставленной задачи. Кратко рассмотрены несколько частных случаев, демонстрирующих связь предлагаемого подхода с методами статистики обратных траекторий и задачами о прямом моделировании рассеяния примеси в атмосфере. Приведен пример решения поставленной задачи — среднее эффективное поле мелкодисперсного аэрозоля в регионе Дальнего Востока, рассчитанное по данным восьми пунктов солнечной фотометрии в системе мониторинга AERONET.

Ключевые слова: атмосфера, мониторинг, моделирование, постановка задачи, уравнения сохранения, лагранжевы частицы, обратные траектории, восстановление поля концентрации, источники эмиссии; atmosphere, monitoring, simulation, formulation of the problem, conservation equations, Lagrangian particles, back trajectories, retrieval of the concentration field, sources of emission.

Введение

Задача расчета (моделирования) пространственного распределения концентрации атмосферной примеси — одна из ключевых задач физики атмосферы [1–3]. В классической постановке для ее решения необходимо задать уравнения, описывающие процессы переноса и трансформации примеси в атмосфере, область моделирования, расположение и характеристики источников примеси, начальные и краевые условия. В такой постановке дополнительные (для строгой математической постановки задачи — избыточные) данные результатов измерений концентраций примеси обычно либо используются для контроля правильности решения, либо игнорируются.

Следует отметить, что в последнее время при решении сложных задач все шире развиваются и применяются технологии коррекции результатов расчетов в ходе численного решения с помощью методов ассимиляции (усвоения) данных измерений [4]. Примерами такого подхода могут служить работы [5, 6].

Большие успехи достигнуты в разработке и использовании методов решения обратных задач, являющихся более сложной математической проблемой, чем прямое решение уравнений переноса [7]. Например, в [8] представлен вариант метода Байеса,

позволяющий по данным измерений оценивать параметры источников атмосферной примеси в случае, когда число таких источников заранее не известно. В [9] метод Байеса успешно использован для восстановления эмиссии радионуклидов после аварии на АЭС «Фукусима-1» по измерениям станций мониторинга.

Широкое распространение получило использование данных расчетов прямых и обратных траекторий движения воздушных частиц для анализа результатов самых разных атмосферных исследований. Множество примеров решения задач физики атмосферы с помощью траекторных (лагранжевых) моделей можно найти в обзорах [10–12].

Возможное использование метода обратных траекторий для идентификации источников примеси было отмечено в [13, 14]. Активно развивает и применяет траекторные методы международная группа исследователей: А.Н. Лукьянов, Ш.Ш. Максюттов с соавт. [15]. Оригинальный метод анализа дальнего переноса примесей в Арктический регион с оценками влияния удаленных источников на ряд российских заповедников разработан А.А. Виноградовой с соавт. в большом цикле работ [16, 17]. Этот метод расчета полей функции потенциальных источников опирается на совместное использование обратных траекторий и приближенное аналитическое решение прямой задачи переноса.

Некоторое время назад был предложен принципиально новый подход к использованию данных измерений концентраций атмосферных примесей,

* Василий Алексеевич Поддубный (Vassily.Poddubny@gmail.com); Екатерина Сергеевна Дубинкина (EkaterinaN@ecko.uran.ru).

реализованный в методах статистики обратных траекторий (СОТ) [18, 19]. Во всех методах СОТ для каждого момента выполнения измерения производится расчет обратной траектории движения воздуха (лагранжевой частицы) из точки, где осуществляется измерение. Каждой траектории сопоставляется измеренное прибором значение концентрации. В большинстве методов СОТ считается, что концентрация примеси вдоль траектории не изменяется. При достаточно длительном периоде выполнения измерений, охватывающем большое разнообразие метеорологических условий, обратные траектории перекрывают значительную область пространства, многократно проходя через одни и те же расчетные ячейки. Это позволяет выполнить статистические оценки концентрации (или функций от нее) для каждой расчетной ячейки с достаточным числом траекторий, проходящих через нее, и затем построить пространственные распределения анализируемых характеристик. Указанные методы позволяют выполнять приближенные статистические оценки пространственной структуры поля атмосферной примеси без знания местоположения и мощностей источников.

Развитием методов СОТ является предложенный сравнительно недавно метод флюид-локации атмосферы (ФЛА) [20, 21], который объединяет статистический анализ и решение уравнений переноса примеси вдоль траекторий движения лагранжевых частиц.

Методы СОТ и ФЛА в оценке пространственного распределения примеси в атмосфере на основе данных измерений в малом числе пунктов (в некоторых случаях в одном) основываются на следующем положении. Исходя из определения атмосферы как нестационарной динамической системы с непрерывно движущимися воздушными частицами, можно считать, что результаты измерений параметров атмосферы (концентраций примесей) характеризуют не только точку, где проводится измерение, но и те области пространства, из которых пришли воздушные потоки. Выполняя прямое измерение в некоторой точке, исследователь фактически осуществляет также и косвенные измерения вдоль траектории движения воздушной частицы (при условии, что он может корректно учитывать изменения ее параметров при движении в атмосфере). Информация о поступлении и количестве примеси в воздухе переносится к прибору из удаленных областей пространства благодаря движению воздушных потоков, что позволяет говорить о пассивной ветровой «локации» атмосферы.

К настоящему времени накопилось много публикаций по использованию методов СОТ для оценки структуры полей атмосферных примесей по данным локальных измерений. Во всех исследованиях основное внимание уделяется физическому обоснованию того или иного метода, его численной реализации и анализу получаемых с его помощью результатов, но отсутствует формальное описание постановки решаемых задач, что не позволяет строго очертить границы применимости разных вариантов

методов СОТ, а также определить наиболее перспективные направления их развития. Цель нашей работы — общая физико-математическая постановка задачи оценки средних «эффективных» полей концентраций и параметров источников атмосферных примесей на основе данных измерений концентраций примеси и информации о динамике атмосферы.

Постановка задачи о пассивной ветровой локации атмосферы

Пусть поле скоростей ветра $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ (а в общем случае и других метеорологических параметров) известно. При решении глобальных или региональных задач можно использовать поля метеорологических величин из баз данных реанализа: Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды ECMWF [22], архива данных Национального управления океанических и атмосферных исследований США NOAA-NCEP/NCAR [23] или других информационных центров. Для решения региональных или даже локальных задач можно использовать результаты прямых расчетов с помощью известных программных инструментов для моделирования мезомасштабных полей метеорологических величин WRF [24], MM5 [25] и т.п.

Для простоты изложения рассмотрим вначале частный крайний случай, когда информация о расположении и характеристиках источников примеси полностью отсутствует. Ниже будет сформулировано несложное очевидное обобщение для комбинированной задачи, включающей известные источники, измерения в пунктах мониторинга и границы с заданными входными потоками.

Пусть имеется $m \geq 1$ пунктов мониторинга, расположенных в заданных точках \mathbf{r}_m , в которых в известные моменты времени $t_{m,k}$ измеряются концентрации примеси $\phi(\mathbf{r}_m, t_{m,k}) = \phi_{m,k} \geq \phi_0 \geq 0$. В некоторых, но не во всех случаях результаты измерений могут быть равны минимальной («фоновой») для исследуемого региона концентрации ϕ_0 . Из рассмотрения не исключаются варианты задачи, когда в распоряжении исследователя имеется лишь один пункт мониторинга $m = 1$. Поскольку в общем случае время выполнения замеров у разных приборов не синхронизировано, то каждый момент измерения идентифицируется двойным индексом: m — номер пункта измерения (определяет место выполнения замера), k — порядковый номер замера в соответствующем пункте.

Для каждого момента времени и произвольной точки пространства, в том числе и для точек, в которых выполняются измерения, существует единственная обратная/прямая траектория движения лагранжевой частицы. Задача нахождения прямых и обратных траекторий и точность их расчета рассмотрены во множестве публикаций (см., например, обзор [26]). Наиболее известное программное обеспечение, используемое для этих целей, — это комплексы программ FLEXTRA/FLEXPART [27],

HYSPLIT [28], LAGRANTO [29], NAME [30], STILT [31], TRAJ3D [32] и др.

Для траекторий движения лагранжевых частиц, которые проходят через точки мониторинга в моменты выполнения измерений, можно сформулировать задачи Коши о распределении концентраций примеси φ вдоль каждой из траекторий под номером p :

$$\frac{D\varphi(\mathbf{r}_p(t), t)}{Dt} = J(\mathbf{r}_p, t) + F_L(\varphi, \mathbf{r}_p, t),$$

$$\varphi(\mathbf{r}_m, t_{m,k}) = \varphi_{m,k}, \quad (1)$$

где D/Dt — оператор субстанциональной или полной производной по времени (производной Лагранжа), в системе эйлеровых координат, как обычно, имеет вид $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \partial/\partial \mathbf{r}$; $\mathbf{r}_p(t)$ — траектория лагранжевой частицы под номером p , проходящая через точку мониторинга m в момент времени $t_{m,k}$ (таким образом, пара индексов m, k однозначно определяет номер траектории p); $J(\mathbf{r}, t)$ — мощность источников поступления примеси в атмосферу, в методе ФЛА и других методах СОТ эта функция не известна; $F_L(\varphi, \mathbf{r}, t)$ — функция, описывающая в лагранжевом представлении физико-химические процессы, изменяющие содержание примеси в атмосфере. В общем виде $F_L(\varphi, \mathbf{r}, t)$ зависит от неизвестной концентрации примеси, пространственных координат, времени и может описывать такие процессы, как сухое осаждение, вымывание примеси, радиоактивный распад, химические и фотохимические реакции, конденсацию, испарение, коагуляцию, диффузионные процессы, включая турбулентную диффузию и т.п. Для демонстрации общего принципа развиваемого подхода и охвата всего множества возможных вариантов постановки задачи о ФЛА, вид этой функции в работе конкретизирован не будет. Случаи, когда вид входящих в нее операторов имеет принципиальное значение (например, при необходимости учета диффузионных процессов), будут рассмотрены позже.

В классической постановке прямой задачи о моделировании рассеяния примеси в атмосфере функция $J(\mathbf{r}, t)$, определяющая расположение и мощности источников примеси, должна быть задана в явном виде. В этом случае начальные условия в задаче Коши задаются для точек (отрезков линий, поверхностей, объемов), где расположены источники примеси (точечные, линейные, поверхностные, объемные), а также для точек границ расчетной области, где заданы краевые условия первого рода. Для решения задачи используются прямые траектории движения лагранжевых частиц, начинающиеся в этих точках.

Как отмечено выше, в задаче о ФЛА расположение и мощности источников примеси $J(\mathbf{r}, t)$ и распределение концентрации примеси $\varphi(\mathbf{r}, t)$ неизвестны. Очевидно, что задача (1) в такой постановке не является полной — для нахождения распределения концентрации вдоль траекторий недостаточно информации, так как функция $J(\mathbf{r}, t)$ неизвестна. Цель

дальнейшего анализа заключается в такой модификации уравнений (1) и самой постановки задачи, чтобы при сохранении физического содержания и соблюдении определенных ограничений стали возможными оценки неизвестного распределения концентрации примеси в пространстве, местоположения неизвестных источников примеси и их мощности. Основным упомянутым выше ограничением является требование о нахождении не мгновенных значений неизвестных величин, а их аналогов — осредненных по времени и по ячейкам пространства функций, называемых далее средними эффективными полями.

Разобьем всю область пространства, где ищется распределение концентрации, на множество замкнутых непересекающихся расчетных ячеек конечного объема V , плотно заполняющих все пространство. Введем в рассмотрение новую функцию — среднее эффективное поле концентрации, которая определяется на основе множества интегралов от концентрации примеси вдоль траекторий движения лагранжевых частиц.

Определение 1. Среднее эффективное поле концентрации примеси $\bar{\varphi}_{V,T}$ на множестве расчетных ячеек V за период времени T есть функция

$$\bar{\varphi}_{V,T}(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sum_{p=1}^{N_{V,T}} (\tau_{p,V})} \sum_{p=1}^{N_{V,T}} \left[\int_{t_{p,V}}^{t_{p,V} + \tau_{p,V}} \varphi(\mathbf{r}_p(t), t) dt \right], \quad (2)$$

в которой $N_{V,T}$ — общее число воздушных частиц (конечных размеров или бесконечно малых лагранжевых частиц), проходящих через расчетную ячейку V за период времени T ; \sum_p — суммирование

по всем частицам (с известными значениями концентрации), прошедшим через расчетную ячейку; $t_{p,V}$ — момент времени входа частицы p в расчетную ячейку V ; $\tau_{p,V}$ — продолжительность нахождения траектории p внутри расчетной ячейки V ; интегрирование в (2) выполняется вдоль траекторий индивидуальных частиц.

Формула (2) является определением среднего по времени значения концентрации в текущей ячейке V , рассчитанного с помощью некоторого бесконечного счетного или конечного множества лагранжевых траекторий. При стремлении размеров ячейки к нулю $V \rightarrow 0$ и $N_{V,T} \neq 0$ среднее эффективное поле стремится к значению средней по времени концентрации в точке. В случае фиксированных размеров расчетных ячеек и бесконечно большого числа лагранжевых частиц $N_{V,T} \rightarrow \infty$, $V = \text{const}$ (при этом объемы лагранжевых частиц стягиваются в точки) среднее эффективное поле концентрации представляет собой множество значений средней концентрации в конечном числе расчетных ячеек.

В случае, когда в определении (2) суммирование выполняется по ограниченному подмножеству траекторий $N_{V,T} = \text{const} \neq 0$, $V = \text{const} \neq 0$, вдоль которых значения концентраций известны, среднее

эффективное поле дает лишь приближенную статистическую оценку истинного среднего. Тогда значение среднего эффективного поля концентрации в расчетной ячейке V можно рассматривать как оценку истинного среднего (от генеральной совокупности всех траекторий), полученную на основе выборки конечных размеров.

Для того чтобы осреднение по (2) имело смысл и приемлемую точность, через расчетную ячейку должно проходить достаточно большое число траекторий, чтобы выборочное среднее «не слишком сильно» отличалось от истинного среднего. (Меру отличия, как обычно, можно задать априори, например как процент допустимого отклонения от истинного среднего генеральной совокупности.)

Определение 2. Среднее эффективное поле источников $\tilde{J}_{V,T}$ на множестве расчетных ячеек V за период времени T есть функция, зависящая от среднего эффективного поля концентрации $\tilde{\varphi}(\mathbf{r})$:

$$\tilde{J}_{V,T}(\tilde{\varphi}, \mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{VT} \int_{t_0}^{t_0+T} \left[\oint_{S_V} (\tilde{\varphi}(\mathbf{v}) \cdot d\boldsymbol{\sigma}) \right] dt + \frac{1}{VT} \iiint_V \left[\tilde{\varphi} - \tilde{\varphi}^* - \int_{t_0}^{t_0+T} F_E(\tilde{\varphi}, \mathbf{r}, t) dt \right] dV. \quad (3)$$

Здесь T — период осреднения; t_0 — начало периода осреднения; S_V — площадь поверхности, охватывающей расчетную ячейку V ; $d\boldsymbol{\sigma}$ — элемент поверхности, ориентированный «наружу» ячейки; $\tilde{\varphi}^*$ — значение функции $\tilde{\varphi}$ за предыдущий период осреднения $t < t_0$; $F_E(\tilde{\varphi}, \mathbf{r}, t)$ — известная функция, описывающая в эйлеровом представлении физико-химические процессы, приводящие к изменению концентрации примеси в атмосфере.

В этом определении правая часть формулы представляет собой интегральную запись типичного уравнения сохранения, принимающего в дифференциальной форме в эйлеровых координатах для некоторой пробной функции $f(\mathbf{r}, t)$ известный вид $\partial f / \partial t + \nabla(f \mathbf{v}) = J_f + F_E(f, \mathbf{r}, t)$. Если за рассматриваемый период времени T среднее эффективное поле не имеет тренда, то можно считать $\tilde{\varphi}^* = \tilde{\varphi}(t_0) = \tilde{\varphi}(t_0 + T) = \tilde{\varphi}$. В противном случае следует рассмотреть последовательность периодов осреднения и задать начальное значение средней эффективной концентрации $\tilde{\varphi}^*$ на основе решения задачи за предшествующий период осреднения.

Определения среднего эффективного поля концентрации (2) и среднего эффективного поля источников (3) сформулированы так, чтобы для них выполнялся закон сохранения (в интегральной его форме), что отражено в определении 2. В предельном случае бесконечно малых размеров расчетных ячеек это условие обеспечивает совпадение средних эффективных функций с обычным средним от концентрации и средней мощностью источников примеси, подчиняющихся соответствующему дифференциальному уравнению сохранения.

Задача о флюид-локации атмосферы. На заданном конечном множестве расчетных ячеек V ,

заполняющих интересующую область пространства; для известного поля скоростей ветра $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, а также полей других метеорологических параметров, необходимых для расчета функции F_L ; на заданном множестве результатов измерений концентрации атмосферной примеси $\varphi_{m,k}$ и множестве траекторий движения лагранжевых частиц $\mathbf{r}_p(t)$, проходящих через точки мониторинга m в моменты времени выполнения измерений $t_{m,k}$, найти такую функцию среднего эффективного поля концентрации $\tilde{\varphi}_{V,T}$, определяемую формулой (2), для которой распределения концентрации $\varphi(\mathbf{r}_p(t), t)$ вдоль траекторий подчиняются следующим уравнениям сохранения в форме Лагранжа с начальными условиями $\varphi_{m,k}$ (задачи Коши на траекториях лагранжевых частиц):

$$\frac{D\varphi(\mathbf{r}_p(t), t)}{Dt} = \tilde{J}_{V,T}(\tilde{\varphi}_{V,T}, \mathbf{r}_p(t)) + F_L(\varphi, \mathbf{r}_p(t), t),$$

$$\varphi(\mathbf{r}_m, t_{m,k}) = \varphi_{m,k}, \quad (4)$$

где $\tilde{J}_{V,T}$ — среднее эффективное поле источников, определяемое формулой (3).

Дифференциальные уравнения (4) совместно с определениями (2) и (3) образуют замкнутую систему уравнений. Для расчета $\tilde{J}_{V,T}$ в (4) необходимо знать $\tilde{\varphi}_{V,T}$, определяемую по формуле (2), в которой под $N_{V,T}$ подразумевается число только тех обратных траекторий, которые пришли в расчетную ячейку из пунктов мониторинга. Общее число решаемых задач Коши равно общему числу всех измерений на всех пунктах мониторинга за весь период осреднения. Каждая задача Коши решается для своего интервала времени и соответствующего набора метеорологических ситуаций.

Сформулированная таким способом задача заключается в следующем. На заданном множестве реализаций полей скорости ветра (и других метеорологических параметров) необходимо найти такие функции среднего эффективного поля концентрации и среднего эффективного поля источников, которые подчиняются уравнениям, описывающим процессы переноса и изменения примеси в атмосфере, а также обеспечивают в заданные моменты времени в пунктах мониторинга реализацию множества известных (измеренных) значений концентраций. Очевидно, что для этого потребуются решить множество уравнений (4) совместно с (2) и (3).

Система интегральных уравнений. Формально проинтегрировав дифференциальное уравнение в задаче Коши (4) вдоль траектории движения p -й лагранжевой частицы от момента выполнения измерения $t_{m,k}$ до произвольного момента времени t , и используя определение (2), несложно получить следующую систему интегральных уравнений, которым подчиняются среднее эффективное поле концентрации $\tilde{\varphi}_{V,T}$ и неизвестная концентрация φ (на лагранжевых траекториях):

$$\tilde{\varphi}_{V,T}(\mathbf{r}) = \frac{1}{T_V} \sum_{p=1}^{N_{V,T}} \varphi_{m,k} \tau_{p,V}$$

$$+ \frac{1}{T_V} \sum_{p=1}^{N_{V,T}} \int_{t_{p,V}}^{t_{p,V} + \tau_{p,V}} \left\{ \int_{t_{m,k}}^t [\tilde{J}_{V,T}(\tilde{\varphi}_{V,T}, \mathbf{r}_p(t')) + F_L(\varphi, \mathbf{r}_p(t'), t')] dt' \right\} dt, \quad (5)$$

$$\varphi(\mathbf{r}_p(t), t) = \varphi_{m,k} +$$

$$+ \int_{t_{m,k}}^t [\tilde{J}_{V,T}(\tilde{\varphi}_{V,T}, \mathbf{r}_p(t')) + F_L(\varphi, \mathbf{r}_p(t'), t')] dt', \quad (6)$$

где $T_V = \sum_{p=1}^{N_{V,T}} (\tau_{p,V})$ – суммарное время нахождения

всех учитываемых лагранжевых частиц в расчетной ячейке V ; t' и t – переменные интегрирования по траекториям, имеющие смысл времени, причем t представляет моменты времени, когда лагранжева частица находится внутри расчетной ячейки V .

В правых частях уравнений (5) и (6) присутствует функция $\tilde{J}_{V,T}$, зависимость которой от неизвестного среднего эффективного поля концентрации $\tilde{\varphi}_{V,T}$ задается в (3). Таким образом, поставленная задача сводится к необходимости решения системы интегральных уравнений (5) и (6) с учетом формулы (3).

Задача определения поля погрешностей осреднения. Значения среднего эффективного поля концентрации по определению зависят от числа лагранжевых частиц, прошедших расчетную ячейку. Очевидно, что число траекторий в каждой расчетной ячейке различно и уменьшается по мере удаления от пунктов мониторинга. Следовательно, при решении поставленной выше задачи необходимо найти такую область пространства, в которой относительные погрешности осреднения в выражении (2) не превышают некоторой заданной величины. В этой области – зоне моделирования (если она существует для конкретной задачи) – среднее эффективное поле концентрации можно считать приближенной статистической оценкой пространственного распределения средней концентрации атмосферной примеси. Иными словами, расчетную область в такой постановке следует не постулировать заранее, а определять в ходе решения задачи, так как она зависит от направлений и повторяемости прихода воздушных потоков.

Обобщение. Поставленная выше задача о флюидлокации атмосферы может быть распространена на случай, когда характеристики источников (всех или только некоторых) известны, а также известна концентрация примеси на границах расчетной области, заданной априори (а не устанавливаемой в ходе решения). В такой постановке задача включает в себя всю доступную информацию как об источниках, так и о результатах измерений. При этом для источников и границ области с известной концентрацией следует решать уравнения переноса примеси на прямых

траекториях, а для пунктов мониторинга – на обратных траекториях движения лагранжевых частиц. Соответственным образом изменяются начальные условия в задачах Коши (4) и пределы интегрирования в уравнениях (5) и (6). В этом случае известные в пунктах мониторинга результаты измерений будут «подправлять» решение прямой задачи переноса примеси при выполнении операции осреднения по формуле (2).

Принципиальные особенности. Принципиально важными в предлагаемой постановке задачи являются следующие особенности.

Во-первых, физическое содержание всех перечисленных выше задач остается традиционным и определяется хорошо известными уравнениями, описывающими процессы, происходящие с примесью в атмосфере.

Во-вторых, при постановке задачи используются результаты измерений концентрации примеси в пунктах мониторинга. В частном случае, когда информация об источниках полностью отсутствует, исходными данными в задаче являются только эти результаты.

В-третьих, при постановке задачи используются две новые неизвестные функции, являющиеся статистическими оценками истинных распределений концентраций и источников примеси.

Последняя особенность связана с тем, что для оценки местоположения источников примеси только по данным локальных измерений в один конкретный момент времени информации не достаточно. Но задачу можно поставить и решить для длительного периода измерений. Для этого требуется учесть множество различных метеорологических ситуаций, и прежде всего, различных направлений ветрового переноса. При таком подходе ищутся лишь средние эффективные поля концентраций и распределения в пространстве мощностей стационарных или слабо изменяющихся во времени источников атмосферных примесей. Кроме того, даже если решение поставленной задачи существует и единственно, из-за статистического характера определений искомым функций найденные решения следует рассматривать лишь как вероятные, возможные. В реальной ситуации могут присутствовать источники примеси, не обнаруженные при решении поставленной таким образом задачи.

В-четвертых, область моделирования при данном пассивном способе локации атмосферы определяется той областью пространства, в которой находится достаточно большое число обратных (и/или прямых) траекторий. При решении задачи в априори заданной трехмерной области пространства следует специальным образом размещать измерительные приборы, а также «запускать» обратные траектории на разных высотах для того, чтобы иметь возможность просканировать всю расчетную область. В этом случае большое значение приобретают разработка методов восстановления концентрации примеси в вертикальном столбе атмосферы над точкой мониторинга или использование надежных эмпирических или теоретических моделей таких распределений.

Частные случаи

Пассивная примесь. Рассмотрим частный случай «пассивной» примеси, когда вклад в изменение концентрации примеси от различных физико-химических процессов пренебрежимо мал по сравнению со вкладом от внешних источников примеси $F_L \ll \tilde{J}_{V,T}$. Это допущение означает, что концентрация примеси на траекториях изменяется только за счет ее источников, что является несколько более общим случаем по сравнению с ранними методами СОТ, в которых концентрация примеси на траектории предполагается неизменной. В этом частном случае система уравнений (5) и (6) расщепляется и уравнение относительно функции среднего эффективного поля концентрации $\tilde{\varphi}_{V,T}$ принимает вид, который позволяет решать его независимо от (6):

$$\tilde{\varphi}_{V,T}(\mathbf{r}) = \frac{1}{T_V} \sum_{p=1}^{N_{V,T}} \left\{ \varphi_{m,k} \tau_{p,V} + \int_{t_{p,V}}^{t_{p,V} + \tau_{p,V}} \left[\int_{t_{m,k}}^t \tilde{J}_{V,T}(\tilde{\varphi}_{V,T}, \mathbf{r}_p(t')) dt' \right] dt \right\}. \quad (7)$$

В правой части уравнения (7) $\tilde{J}_{V,T}$ в соответствии с (3) зависит только от неизвестного среднего эффективного поля концентрации $\tilde{\varphi}_{V,T}$.

Упрощенная постановка задачи. Если исследователя интересует только восстановление поля концентрации и не интересует определение внешних источников поступления примеси в атмосферу, то в (3) можно не выделять в отдельное слагаемое физико-химические процессы модификации примеси в атмосфере. Можно включить F_E и F_L в состав неизвестной функции источников, т.е. формально положить в формуле (3) $F_E \equiv 0$, а в уравнении (4) $F_L \equiv 0$, что существенно упрощает решения уравнений (4), (2), (3). Но следует помнить, что в таком случае меняется физический смысл величины $\tilde{J}(\mathbf{r})$ — она включает в себя не только мощность эмиссии внешних источников примеси, но и все другие физико-химические процессы, изменяющие концентрацию примеси в атмосфере и обеспечивающие существование (реализацию) среднего эффективного поля концентрации $\tilde{\varphi}(\mathbf{r})$.

Поле концентрации восстановлено по данным дистанционного зондирования. Если поле концентрации примеси известно, например из данных спутникового мониторинга или лидарного наземного зондирования атмосферы, то задача определения местоположения и мощности источников становится почти тривиальной. Для ее решения необходимо применить определение среднего эффективного поля источников и выполнить численное интегрирование в формуле (3), используя вместо среднего эффективного поля концентрации данные дистанционных измерений. Это позволит рассчитать оценки пространственного размещения источников и их мощностей на момент измерений с тем разрешением,

с которым они выполнены. Такой простой вариант задачи о ФЛА можно использовать для определения мощности и идентификации из космоса не только долговременных, но и короткодействующих источников примеси.

Предположение о постоянстве концентрации вдоль траектории (методы СОТ). В большинстве ранних методов СОТ явно или неявно предполагается постоянство концентрации примеси вдоль траектории движения воздушных частиц. Однако в общем случае необходимо учитывать изменение концентрации примеси по мере движения воздушного потока. Причинами такого изменения могут быть как внешние источники примеси, так и различные физические и химические процессы, происходящие с примесью в атмосфере: влажное вымывание (подоблачное, внутриоблачное), сухое осаждение, химические реакции, радиационный распад, диффузия, испарение, конденсация, коагуляция и др. Таким образом, использование в методах СОТ допущения о постоянстве концентрации вдоль траектории значительно ограничивает круг возможных физических задач только теми, в которых с определенной степенью достоверности перечисленными процессами можно пренебречь.

Предположение о постоянстве концентрации примеси вдоль траектории движения, лишает физического смысла уравнения (1) и (4). В этом случае все типы источников/стоков следует считать отсутствующими, а сформулированная ранее задача становится тривиальной. В правых частях уравнений (5) и (6) интегральные операторы обнуляются, а решение записывается в виде алгебраических формул осреднения, фактически совпадающих с формулами из [18] (исключая применяемые в этой работе дополнительные процедуры логарифмирования и сглаживания). В других методах СОТ аналогичным образом для каждой расчетной ячейки непосредственно вычисляются другие статистические функции.

Как видим, указанные методы СОТ можно считать частным случаем, следствием предлагаемого теоретического рассмотрения. При этом следует подчеркнуть, что простейшим физически непротиворечивым вариантом постановки задачи является уравнение (7).

Примеры решения задачи о ФЛА

Поставленная выше задача о пассивной ветровой локации атмосферы охватывает различные методы СОТ, широко представленные во множестве публикаций. Примеры решения более общей задачи о ФЛА, включая методы решения, описание численного алгоритма и некоторые результаты для проблемы дальнего регионального переноса мелкодисперсного аэрозоля изложены в [20, 21, 33–35]. В них на основе анализа данных солнечной фотометрии за 2004–2010 гг. в шести пунктах мониторинга Российского сегмента глобальной сети AERONET [34, 36] с помощью метода ФЛА сделаны оценки среднего

эффективного поля концентрации мелкодисперсного аэрозоля над всей территорией России. Методы оценки погрешностей операции осреднения, использованной в методе ФЛА, а также результаты успешной верификации результатов расчета среднего эффективного поля концентрации мелкодисперсного аэрозоля представлены в [33, 35].

Приведем некоторые результаты решения квазидвухмерной задачи о ФЛА с целью детализации найденного ранее среднего эффективного поля мелкодисперсного аэрозоля для региона Дальнего Востока. В качестве исходной информации использовались результаты фотометрических измерений, выполненных на восьми станциях сети AERONET: № 1 – г. Уссурийск (Россия), № 2 – уезд Сянхэ (XiangHe, Китай), № 3 – г. Пекин (Beijing, Китай), № 4 – г. Фукуока (Fukuoka, Япония), № 5 – о-в Чеджудо (Gosan_SNU, Южная Корея), № 6 – г. Кванджу (Gwangju_GIST, Южная Корея), № 7 – г. Осака (Osaka, Япония), № 8 – г. Сеул (Yonsei-University, Южная Корея). Использовались результаты измерений в столбе атмосферы с 2013 по 2015 г. Расчет обратных траекторий продолжительностью 4 сут, при высоте старта на изобарической поверхности 950 гПа, выполнялся с помощью программно-обеспечения HYSPLIT [28]. Для представленных далее результатов пространственное разрешение, соответствующее размерам ячеек эйлеровой сетки, составило $1^\circ \times 1^\circ$. Решалась система уравнений (7).

Зона влияния на пункты измерения, т.е. область пространства, из которой приходили траектории, и плотность числа траекторий в расчетных ячейках показаны на рис. 1. Звездочками (☆) отмечены пункты мониторинга, а квадратом выделена область, принятая для расчета среднего эффективного поля концентрации мелкодисперсного аэрозоля. Результаты расчетов показывают, что траектории приносят сигнал в пункты измерения из областей, удаленных от них на несколько тысяч километров. Обращает на себя внимание асимметрия зоны влияния относительно положения пунктов мониторинга, что связано с преимущественно западным и северо-западным переносом воздушных масс для анализируемых широт.

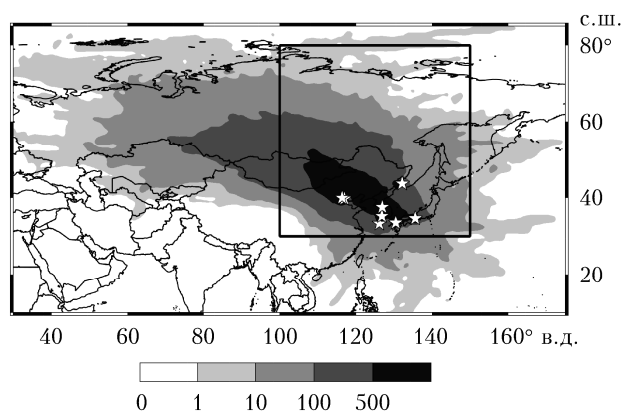


Рис. 1. Плотность числа обратных траекторий в расчетных ячейках размером $1^\circ \times 1^\circ$; ☆ – пункты мониторинга AERONET, из которых «стартовали» обратные траектории

На рис. 2 показаны результаты расчета среднего эффективного поля концентрации мелкодисперсного аэрозоля, нормированного на среднюю за указанный период концентрацию по данным измерений в пункте мониторинга Уссурийск.

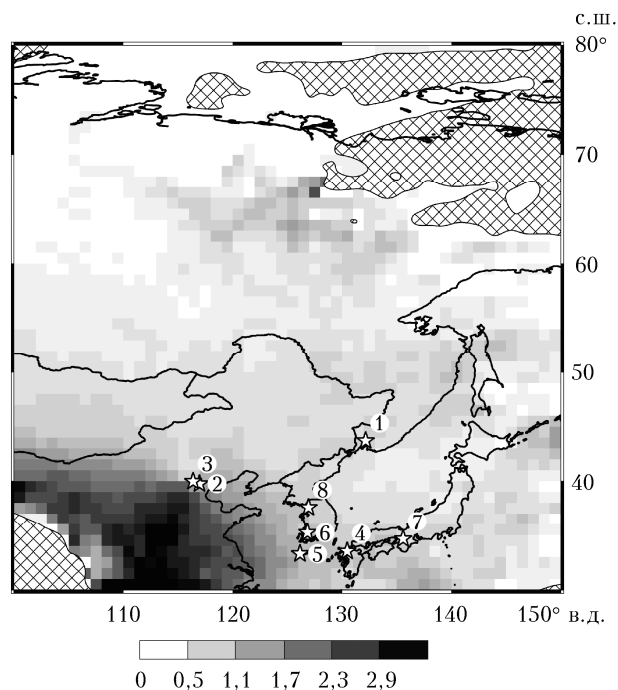


Рис. 2. Среднее эффективное поле нормированной объемной концентрации мелкодисперсного аэрозоля в регионе Дальнего Востока, рассчитанное в задаче о пассивной ветровой локации атмосферы

Заштрихованные части рисунка отмечают области пространства, лежащие вне зоны влияния – из них за период измерений в пункты мониторинга не пришло ни одной траектории. Как видно из рис. 2, территории, где концентрации мелкодисперсного аэрозоля ниже, чем в г. Уссурийске, расположены в основном в северо-восточной части региона. Наибольшее загрязнение атмосферы наблюдается в промышленных районах Китая. Отчетливо прослеживается влияние континента на атмосферу морей, особенно в случае Желтого моря. Известная закономерность уменьшения уровня аэрозольного загрязнения с юга на север также хорошо просматривается. Полученные результаты качественно согласуются с данными многочисленных теоретических и экспериментальных исследований атмосферы региона Дальнего Востока.

Более подробное описание исходных данных, метода решения, полученных результатов, их ограничений и оценки погрешностей будут представлены в отдельной статье.

Заключение

Сформулирована принципиально новая постановка задачи оценки пространственной структуры среднего поля концентрации атмосферной примеси

по данным локальных измерений в одной или нескольких точках мониторинга без привлечения информации об источниках поступления примеси в атмосферу — задача о пассивной локации атмосферы ветровыми потоками. Рассмотрены теоретические основы задачи о флюид-локации атмосферы, которая претендует на то, чтобы на основе совместного статистического анализа результатов измерений и гидродинамического моделирования: 1) найти статистическую оценку распределения в пространстве средней концентрации примеси; 2) определить возможные местоположения источников примеси; 3) оценить средние мощности поступления примеси в атмосферу.

Даны определения двух новых функций: среднего эффективного поля концентрации и среднего эффективного поля источников. В дифференциальном и интегральном представлениях записаны уравнения для их нахождения.

Рассмотрены частные случаи, демонстрирующие связь предлагаемой постановки задачи с методами статистики обратных траекторий, включая метод флюид-локации атмосферы, и с классическими задачами о рассеянии примеси.

Предлагаемый подход может быть использован для решения ряда задач физики атмосферы, например: 1) восстановление на основе результатов измерений глобальных и региональных сетей мониторинга средних полей атмосферных примесей, играющих ключевую роль в процессах изменения климата; 2) по результатам наземных и спутниковых измерений уточнение имеющихся баз данных об источниках поступления в атмосферу парниковых газов и аэрозолей природного и антропогенного происхождения, нахождение ранее не известных источников; 3) решение задач о трансграничном, трансконтинентальном переносе атмосферных примесей и идентификация источников, вызывающих дальний перенос; 4) принципиальное изменение информативности систем мониторинга качества воздуха — получение по данным локальных измерений средних пространственных распределений концентраций, а также оценка по этим данным средних мощностей стационарных источников эмиссии на территории промышленных предприятий, городов, регионов.

Авторы выражают благодарность В.В. Васину (ИММ УрО РАН) за внимание к теме исследования, а также благодарят всех коллег по программе AERONET, обеспечивающих измерения и представление данных глобальной сети аэрозольного мониторинга.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта № 15-15-2-50 Комплексной программы УрО РАН «Разработка метода анализа данных наземного мониторинга парниковых газов и определение источников их поступления в атмосферу Арктической зоны России (на примере о. Белый, ЯНАО)». Расчеты среднего эффективного поля концентрации аэрозоля в регионе Дальнего Востока выполнены при финансовой поддержке РФФ, соглашение № 14-50-00034.

1. *Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.

2. *Берлянд М.Е.* Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнение атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 2008. 448 с.
3. *Jacobson M.Z.* Fundamentals of Atmospheric Modeling. 2nd ed. New York: Cambridge University Press, 2005. 813 p.
4. *Data Assimilation. Making Sense of Observations / W. Lahoz, B. Khattalov, R. Menard (eds.).* Berlin; Heidelberg: Springer, 2010. 718 p.
5. *Климова Е.Г., Куланова Н.В.* Численные эксперименты по оценке эмиссии метана на основе системы усвоения данных о пассивной примеси в атмосфере Северного полушария // Оптика атмосфер. и океана. 2006. Т. 19, № 11. С. 961–964.
6. *Пененко В.В., Цветова Е.А., Пененко А.В.* Методы совместного использования моделей и данных наблюдений в рамках вариационного подхода для прогнозирования погоды и качества состава воздуха // Метеорол. и гидрол. 2015. № 6. С. 13–24.
7. *Васин В.В., Азеев А.Л.* Некорректные задачи с априорной информацией. Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993. 262 с.
8. *Yee E.* Theory for reconstruction of an unknown number of contaminant sources using probabilistic inference // Bound.-Lay. Meteorol. 2008. N 3. P. 359–394.
9. *Бабухина Т.И., Ганьшин А.В., Журавлев П.В., Лукьянов А.Н., Максюттов Ш.Ш.* Оценка выбросов в атмосферу радиоактивных веществ (133XE, 131I, 137CS) при аварии на АЭС «Фукусима-1» методом обратного моделирования // Метеорол. и гидрол. 2016. № 5. С. 44–56.
10. *Fleming L.Z., Monks P.L., Manning A.J.* Review: Untangling the influence of air-mass history in interpreting observed atmospheric composition // Atmos. Res. 2012. V. 104–105. P. 1–39.
11. *Lagrangian modeling of the atmosphere: Geophysical monograph 200 / J. Lin, D. Brunner, C. Gerbig, A. Stohl, A. Luhar, P. Webley (eds.).* Washington: Am. Geophys. Union, 2012. 350 p.
12. *Intercontinental transport of air pollution: The handbook of environmental chemistry 4G / A. Stohl (ed.).* Berlin: Springer, 2014. 312 p.
13. *Куценогий К.П., Смирнова А.И.* Метод обратных траекторий для идентификации источников атмосферных аэрозолей регионального и глобального масштабов // Оптика атмосфер. и океана. 2001. Т. 14, № 6–7. С. 510–514.
14. *Пененко В.В., Цветова Е.А.* Об оценке информативности наблюдательных экспериментов // Оптика атмосфер. и океана. 2000. Т. 13, № 6–7. С. 649–655.
15. *Лукьянов А.Н., Ганьшин А.В., Журавлев П.В., Максюттов Ш.Ш., Варлагин А.В.* Глобальная атмосферная модель рассеяния частиц // Изв. РАН. Физ. атмосфер. и океана. 2015. Т. 51, № 5. С. 570–577.
16. *Виноградова А.А., Веремейчик А.О.* Поле потенциальных источников аэрозольного загрязнения атмосферы в районе Ненецкого заповедника // Оптика атмосфер. и океана. 2012. Т. 25, № 9. С. 760–767; *Vinogradova A.A., Veremeichik A.O.* Potential sources of aerosol pollution of the atmosphere near the Nenetsky Nature Reserve // Atmos. Ocean. Opt. 2013. V. 26, N 3. P. 118–125.
17. *Виноградова А.А., Веремейчик А.О.* Модельные оценки содержания антропогенной сажи в атмосфере Российской Арктики // Оптика атмосфер. и океана. 2013. Т. 26, № 6. С. 443–451.
18. *Seibert P., Kromp-Kolb H., Baltensperger U., Jost D.T., Schwikowski M., Kasper A., Puxbaum H.* Trajectory analysis of aerosol measurements at high Alpine sites //

- Transport and transformation of pollutants in the troposphere. Den Haag: Academic Publ., 1994. P. 689–693.
19. *Stohl A.* Trajectory statistics – a new method to establish source-receptor relationships of air pollutants and its application to the transport of particulate sulfate in Europe // *Atmos. Environ.* 1996. V. 30, N 4. P. 579–587.
 20. *Поддубный В.А.* Метод флюид-локации атмосферы // *Матер. XVI Междунар. симпоз. «Оптика атмосф. и океана. Физ. атмосф.»*. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2009. С. 502–504.
 21. *Поддубный В.А., Наговицына Е.С.* Восстановление пространственного поля концентрации атмосферного аэрозоля по данным локальных измерений: модификация метода статистики обратных траекторий // *Изв. РАН. Физ. атмосф. и океана*. 2013. Т. 49, № 4. С. 439–446.
 22. *URL*: <http://apps.ecmwf.int/datasets/> (last access: 17.02.2017).
 23. *URL*: <ftp://arlftp.arlhq.noaa.gov/archives/reanalysis/> (last access: 17.02.2017).
 24. *URL*: <http://www.wrf-model.org/index.php/> (last access: 18.02.2017).
 25. *URL*: <http://www2.mmm.ucar.edu/mm5/mm5-home.html> (last access: 28.02.2017).
 26. *Stohl A.* Computation, accuracy and applications of trajectories – a review and bibliography // *Atmos. Environ.* 1998. V. 32, N 6. P. 947–966.
 27. *Stohl A., Forster C., Frank A., Seibert P., Wotawa G.* Technical note: The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART Version 6.2. // *Atmos. Chem. Phys.* 2005. V. 5. P. 2461–2474.
 28. *Draxler R.R., Hess G.D.* An Overview of the HYSPLIT-4 modelling system for trajectories, dispersion and deposition // *Australian Meteorol. Mag.* 1998. V. 47. P. 295–308.
 29. *URL*: <http://iacweb.ethz.ch/staff//sprenger/lagranto/> (last access: 9.07.2017).
 30. *URL*: <http://www.metoffice.gov.uk/research/modelling-systems/dispersion-model> (last access: 20.07.2017).
 31. *URL*: <http://www.stilt-model.org/pmwiki/pmwiki.php> (last access: 23.07.2017).
 32. *URL*: <http://www.cycstats.org/trajectories/trajhome.htm> (last access: 30.07.2017).
 33. *Поддубный В.А., Наговицына Е.С.* Оценка погрешностей и верификация метода флюид-локации атмосферы // *Оптика атмосф. и океана*. 2014. Т. 27, № 10. С. 869–877; *Poddubny V.A., Nagovitsyna E.S.* Estimate of errors and verification of the method of fluid location of the atmosphere // *Atmos. Ocean. Opt.* 2015. V. 28, N 3. P. 282–290.
 34. *Исследование* радиационных характеристик аэрозоля в азиатской части России / под ред. С.М. Сакерина. Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2012. 484 с.
 35. *Дубинкина Е.С.* Моделирование аэрозольных полей на основе совместного анализа данных солнечной фотометрии и информации о динамике атмосферы: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. Томск: ИОА СО РАН. Томск, 2015. 18 с.
 36. *Holben B.N., Eck T.F., Slutsker I., Tanre D., Buis J.P., Setzer A., Vermote E., Reagan J.A., Kaufman Y.J., Nakajima I., Lavenu F., Jankowiak I., Smirnov A.* AERONET – a federated instrument network and data archive for aerosol characterization // *Remote Sens. Environ.* 1998. V. 66. P. 1–16.

V.A. Poddubny, E.S. Dubinkina. The problem of fluid location of the atmosphere for the estimation of pollution fields and retrieval of source.

A fundamentally new physico-mathematical formulation of the problem of retrieving the average field of atmospheric contaminant concentrations and detecting emission sources from local measurements is presented. This is a problem of passive location of the atmosphere by wind or a problem of fluid location of the atmosphere. The definitions of new functions are given: the mean effective concentration field and the mean effective field of the sources. The differential and integral forms of equations for the solution of the problem are presented. Several particular cases are briefly considered, which show the relationship of the proposed approach with the methods of back trajectories statistics and direct atmospheric dispersion simulation.