

МОНИТОРИНГ, БАЗА ДАННЫХ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА АЭРОЗОЛЕЙ В СИБИРИ*

К. П. КУЦЕНОГИЙ

Институт химической кинетики и горения СО РАН

Новосибирск, Россия

e-mail: koutsen@kinetics.nsc.ru

Г. С. РИВИН

Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия

e-mail: rivin@adm.ict.nsc.ru

The results of the experimental and theoretical research of the atmospheric aerosol characteristics are described obtained in the course of ground monitoring in Siberian region. This study is a stage of the development of the data base “Aerosols of Siberia” and working out various mathematical models for the assimilation of meteorological and aerosol data (as well as geoinformation), and for carrying out various computer experiments and environmental expert assessments.

1. Введение

В рамках инициативного проекта “Аэрозоли Сибири”, начиная с 1991 г., при широкой кооперации многих институтов СО РАН на территории Сибири начались исследования различных характеристик атмосферных аэрозолей и их пространственно-временной изменчивости. Одна из задач этих исследований — выяснение источников и стоков атмосферных аэрозолей (АА) в Сибирском регионе и оценка влияния АА на уровни загрязнения биосферы, качество окружающей среды, растительный и животный мир, здоровье человека и климат на локальном, региональном и глобальном масштабе. Подробно цели, задачи и программы исследований изложены в [1]. Для реализации сформулированной цели на базе сети научных станций и стационаров СО РАН был организован мониторинг АА, охватывающий значительную часть Сибири [2].

С момента начала осуществления проекта и до настоящего времени ведутся систематические измерения основных характеристик аэрозолей — дисперсного и химического состава аэрозольных частиц и их пространственно-временной эволюции, проводится изучение процессов образования, трансформации и распространения аэрозолей и расчет уровней

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант №98-05-165302, и Интеграционного гранта СО РАН №27.

© К. П. Куценогий, Г. С. Ривин, 1998.

загрязнения окружающей среды. В качестве инструмента при изучении указанных процессов использован вычислительный эксперимент [3]. Материалы этих исследований постоянно публикуются в периодической печати и специальных выпусках журнала “Оптика атмосферы и океана” [4–10].

В настоящей статье рассмотрен первый этап работы, описаны результаты наземного мониторинга аэрозолей Сибири, изложены математические модели и результаты вычислительных экспериментов, представлены данные исследования физико-химических превращений пестицидных аэрозолей. В заключении сформулированы основные выводы и перспективы дальнейшей работы.

2. Изучение характеристик и создание базы данных по атмосферным аэрозолям Сибири

В настоящее время на территории Сибири для реализации проекта “Аэрозоли Сибири” на базе геофизических и биологических стационаров СО РАН организована система мониторинга характеристик атмосферных аэрозолей. На рис. 1 представлена карта, на которой показаны те пункты в Сибири, где были отобраны образцы АА, полученные как в результате многолетних отборов на стационарах, так и в период специальных маршрутных обследований, включая речные суда и самолет. Видно, что сеть мониторинга АА охватывает значительную часть Сибирского региона и позволяет вести комплексные биогеохимические исследования не только локального и регионального, но и глобального масштаба. Проиллюстрируем это утверждение некоторыми примерами.

На рис. 2 приведены результаты определения ионного состава АА (работа выполнена ИНХ СО РАН совместно с ЛИ СО РАН) на территории, указанной на рис. 1. В кружках здесь показаны отношения мольных концентраций катионов NH_4^+ и Na^+ (верхняя и нижняя цифры соответственно) к основному аниону SO_4^{2-} . Первый катион отражает процессы

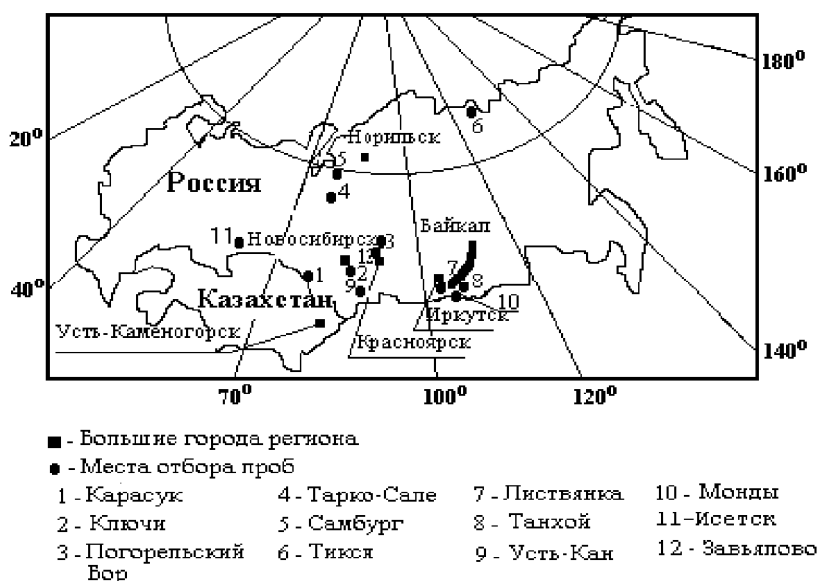


Рис. 1.

формирования ионного состава АА в результате гетерогенных реакций с газообразными



Рис. 2.

предшественниками и обычно классифицируется как признак континентального происхождения. Второй катион, как правило, используется для идентификации АА морского типа, связанных с ветровой эрозией водной поверхности морей и океанов.

Из рис. 2 видно, что, как и следовало ожидать, по всей границе, охваченной сетью наземного мониторинга, преобладающим компонентом катионной составляющей является аммоний. Однако в Новосибирской области в зимний период обнаруживается значительное содержание натрия. Последнее трудно объяснить дальним транспортом Na^+ с акваторий Северного Ледовитого океана, так как в зимний период он скован льдом. Поэтому мы считаем, что появление данного иона связано с почвенно-эрозионным выносом сульфата натрия либо с территории Кулундинских степей, либо с района Аральского моря. Подтверждением этому, в частности, может служить среднеклиматическое направление ветра, которое показано на рис. 2 стрелкой.

Пример выяснения типа источника и его пространственно-временного масштаба приведен на рис. 3 и 4. Разработанный ИХКиГ СО РАН совместно с ИЯФ СО РАН метод определения многоэлементного состава с использованием синхротронного излучения [11] позволяет определять в аэрозольных частицах одновременно более 30 элементов. На рис. 3, а показано, как варьирует среднесуточная концентрация железа в аэрозольных частицах в двух пунктах наблюдения на юге Западной Сибири, расстояние между которыми равно 450 км. Видно, что за период наблюдений содержание железа в частицах может меняться почти в сто раз. На рис. 3, б приведено изменение относительной концентрации некоторых элементов (Са, Мп, Тi) в грубодисперсной части АА ($d > 1 \mu m$) в тех же точках.

Из данных по коэффициенту обогащения (отношение относительного содержания элемента в аэрозольных частицах к кларковому содержанию в земной коре) указанных выше

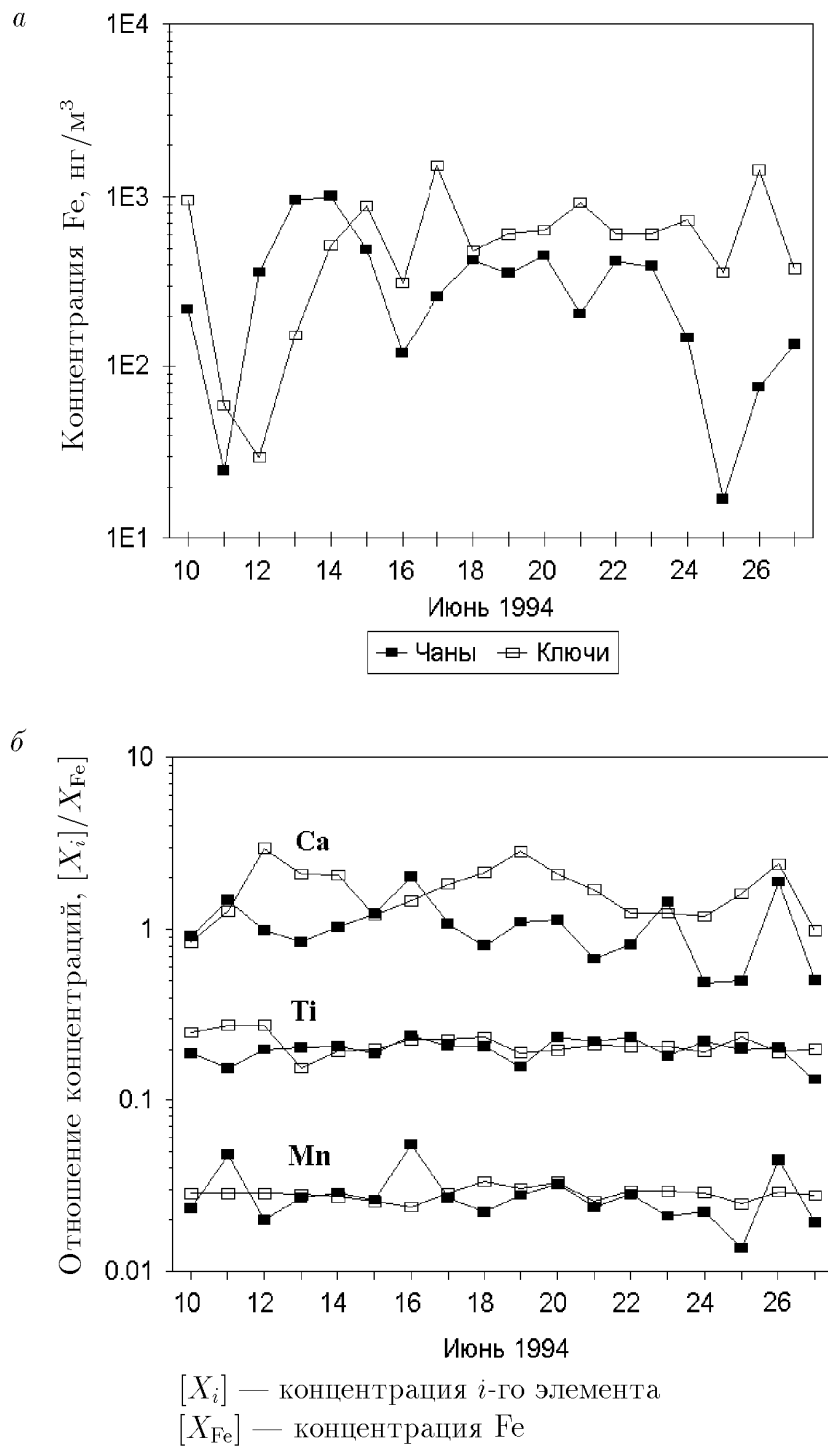


Рис. 3.

элементов они должны образовываться в результате почвенно-ветровой эрозии. Из рис. 3 видно, что относительная концентрация Ca, Mn, Ti, действительно, практически не меняется в течение всего периода наблюдений и не зависит от места, где проводятся измерения. Это указывает на то, что почвенно-эрозионный источник образования АА на юге Западной Сибири в летний период имеет по крайней мере региональный масштаб.

На рис. 4 представлены результаты исследований относительного многоэлементного состава АА на территории Западной Сибири в зимний и летний период. Из сравнения рис. 4, а, б видно, что среднемесячные значения многоэлементного состава отчетливо изменяются от летнего сезона к зимнему. В теплый период значительная часть АА Западной Сибири вызвана почвенно-эрозионными процессами. В зимний же период большая часть элементов расположена выше кривой, характеризующей относительное (кларковое) содержание элементов в земной коре. Это свидетельствует о их антропогенном происхождении. Нижний график иллюстрирует относительное содержание различных элементов в зимний период в двух точках наблюдений на севере Западной Сибири, которые удалены друг от друга на 200 км. Видно, что и на севере Западной Сибири АА носят региональный характер. Из сравнения рис. 4, б, в можно сделать вывод о том, что АА Сибири носят не только региональный, но и глобальный характер.

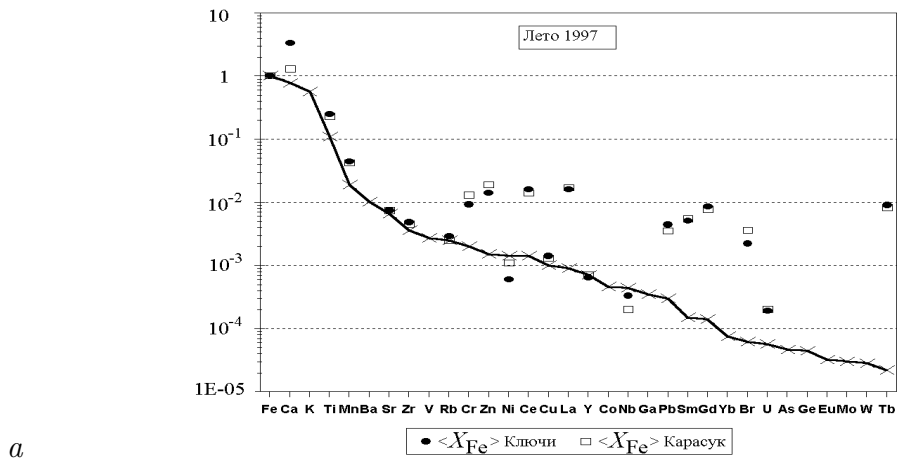
В таблице приведен пример использования методики определения многоэлементного состава индивидуальных аэрозольных частиц для идентификации типов источников в Сибири. Эти исследования ведутся совместно с учеными из Бельгии и Германии в рамках проекта INTAS “Атмосферные аэрозоли на азиатской территории бывшего СССР” [12, 13]. Видно, что многоэлементный состав индивидуальных частиц позволяет идентифицировать до восьми различных типов источников в Сибирском регионе при одновременном определении в частице набора из 11 элементов.

Анализ многоэлементного состава атмосферных аэрозолей в Новосибирской области методом EPXMA.

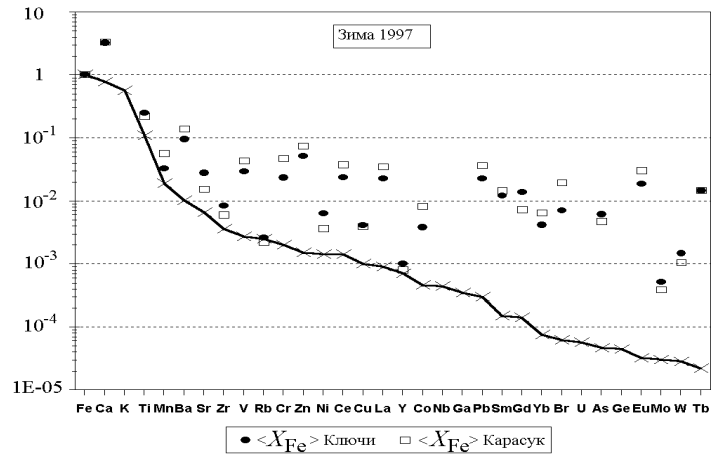
Карасук — Зима		Карасук — Лето		Ключи — Лето	
Тип частиц	%	Тип частиц	%	Тип частиц	%
Si, Al, Fe	57.4	Si, Al, Fe	64.0	Si, Al, Fe	53.5
Ca, S	11.4	Ca, S	10.4	Ca, S	19.6
Si, S, Fe	11.4	Fe, Si	10.4	Fe, Zn, Ti	8.5
Fe	9.1	Cl, K, P, S	7.1	Fe	8.0
Pb	5.2	Ca, Si	6.8	P, S, K	3.9
S	3.5	Pb	1.3	S	3.5
Zn	1.2	—	—	K, Cl	2.1
Ti	0.7	—	—	Pb	0.9

3. Математическое моделирование

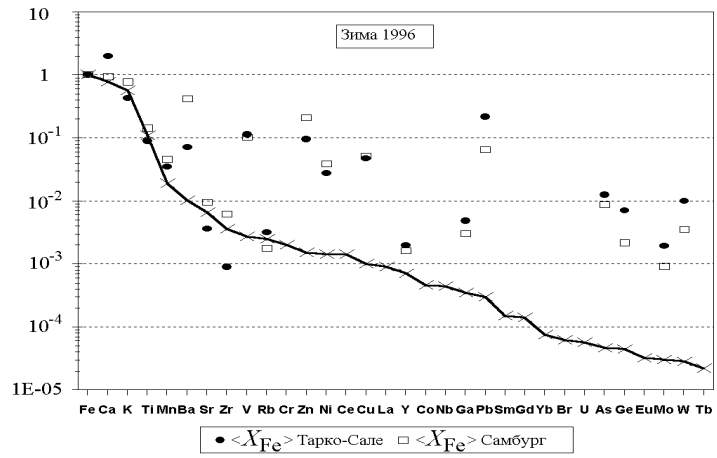
Накопленные к настоящему времени экспериментальные данные позволили приступить к формированию базы данных по АА Сибири и разработке региональных математических моделей для описания закономерностей их распространения и оценки зон влияния источников АА, а также оптимизации системы мониторинга [14–22]. Эти исследования ведутся совместно ИХКиГ, ИВТ и ИМиГМ СО РАН. Важной составной частью такой базы являются не только данные измерений для газообразных и аэрозольных примесей, но



a



б



в

Рис. 4.

и данные о метеорологических полях. За основу выбран архив Реанализа, подготовленный в Национальных центрах прогноза окружающей среды США и Национальном центре атмосферных исследований США [23]. В работах [18, 19] с помощью данных Реанализа и методики, использующей предварительное построение обратных траекторий, получена предварительная оценка возможных зон влияния на распределение аэрозолей в Новосибирском регионе.

Для проведения вычислительных экспериментов как инструмент для исследования разработана система МАР математического моделирования атмосферных процессов в регионе [3, 14]. Основными свойствами системы являются экономичность, мобильность и доступность в сочетании с достаточной точностью описания атмосферных процессов. Основные компоненты системы МАР следующие:

анализ — восстановление значений метеополей в узлах регулярной сетки по данным наблюдений;

инициализация — проецирование начальных полей в подпространство медленных многообразий;

модель атмосферы;

модель переноса примесей;

блок визуализации.

Такая система моделирования позволяет проводить исследования методов математического моделирования, анализа данных наблюдений, усвоения данных в квазиоперативных условиях на реальных данных.

В системе МАР для описания распространения примеси в атмосфере использовано уравнение, которое в системе координат (x, y, p) имеет вид

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} + (\tau - \tau_g) \frac{\partial \varphi_i}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial p} K_p \frac{\partial \varphi_i}{\partial p} + C_i + P_i + S_i,$$

где φ_i — объемная концентрация i -го ингредиента; u, v, τ — компоненты скорости ветра; τ_g — скорость гравитационного осаждения аэрозолей; K_x, K_y — коэффициенты горизонтальной диффузии; K_p — коэффициент вертикальной диффузии; C_i — член, учитывающий химические превращения; P_i — член, учитывающий вымывание примесей осадками; S_i — источник выброса i -го ингредиента.

В качестве начального и граничных условий на нижней и верхней границе области определения D функций $\varphi_i(x, y, p, t)$ использованы соответственно следующие:

$$\varphi_i|_{t=0} = g_i(x, y, p),$$

$$K_p \frac{\partial \varphi_i}{\partial p} - \beta \varphi_i = 0,$$

$$\varphi_i = 0,$$

где g_i — известные функции, β — параметр, характеризующий взаимодействие примеси с подстилающей поверхностью.

На боковых границах ∂D задана нулевая концентрация:

$$\varphi_i|_{(x,y,p) \in \partial D} = 0.$$

Решение отыскивается на сетке с шагом 30 км по горизонтальным переменным (251×211 узлов сетки) и 19 уровнями по вертикали (15 стандартных уровней — 10, 20, 30, 50, 70,

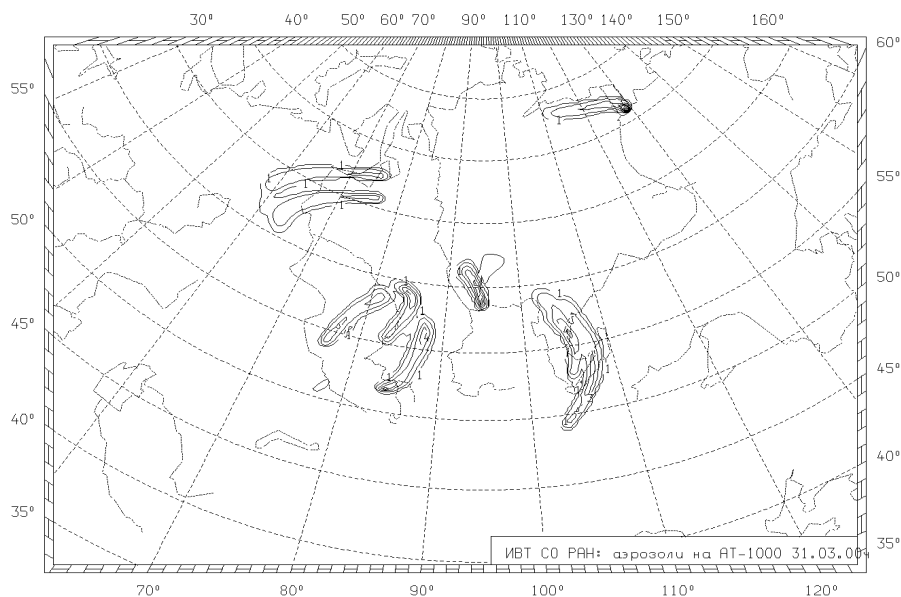


Рис. 5.

100, 150, 200, 250, 300, 400, 500, 700, 850, 1000 мб и 4 дополнительных уровня для описания пограничного слоя атмосферы — 880, 910, 940, 970 мб).

Для нахождения решения конечно-разностной схемы уравнения переноса использован метод расщепления по физическим процессам на основе схемы Ботта. Обоснование выбора схемы Ботта в качестве монотонной разностной схемы дано в [20], изучение свойств разработанной модели и ее описание приведены в [21, 22].

Для характеристики свойств модели на рис. 5 приведены изолинии поля концентраций аэрозоля на поверхности 1000 мб по данным о полях ветра за 30–31 марта 1991 г., полученные при проведении имитационного эксперимента. В этом эксперименте имитируется непрерывный выброс в атмосферу с усвоением информации о концентрации аэрозоля в указанных выше 10 пунктах мониторинга аэрозоля Сибири на уровне 1000 мб без учета локальных преобразований примесей и вымывания их осадками. Из рисунка следует, что разработанная модель применима для проведения имитационного моделирования переноса и стока аэрозолей в Сибирском регионе: отсутствуют нежелательные отрицательные значения; перенос аэрозолей происходит различным образом в зависимости от реального распределения полей ветра в различных пунктах региона, причем направление переноса наблюдается в основном по меридиану в южной Сибири и по параллели в северной части рассматриваемой территории.

4. Мониторинг и исследование физико-химических превращений пестицидных аэрозолей при локальном и региональном транспорте загрязнений в атмосфере

Данные этого исследования связаны с важной экологической проблемой применения пестицидов в защите растений. В многолетних работах, проводимых в ИХКиГ СО РАН, показано, что современные технологии применения пестицидов не являются оптимальными не только с технико-экономической точки зрения, но и с экологических позиций [24].

Наряду с развитием теоретических основ и широкой экспериментальной проверкой оптимальной аэрозольной технологии в защите растений [25, 26, 29] в последние годы ведутся и фундаментальные работы по изучению закономерностей миграции пестицидов в окружающей среде и выяснению физико-химических превращений пестицидных аэрозолей [27–31, 35]. В ходе этих исследований разработаны методика изучения распространения аэрозолей в природных условиях и их взаимодействия с элементами растительности и подстилающей поверхности, а также математические модели для описания поля осадка на растительности и динамики рассеяния аэрозольного облака [27, 32, 33].

Полевые эксперименты по использованию генератора регулируемой дисперсности и разработке математических моделей распространения аэрозолей в приземном и пограничном слоях атмосферы с учетом взаимодействия с растительностью и подстилающей поверхностью ведутся ИХКиГ СО РАН совместно с ИВМиМГ СО РАН [27, 29]. Использование такой методики позволяет проводить натурные эксперименты в широком диапазоне ландшафтно-климатических условий для исследования распространения аэрозолей на расстояние до нескольких километров от источника. Развитие и совершенствование методики определения специфических трассеров позволит использовать данную технологию и для изучения процессов регионального масштаба. В частности, совместно с НИОХ СО РАН разрабатывается хромато-масспектрометрическая методика определения концентрации пестицидов в АА на региональном и глобальном уровне [36].

5. Заключение

Таким образом, к настоящему времени по обсуждаемому вопросу выполнены следующие работы.

1. На территории Сибири создана система наземного мониторинга для измерения пространственно-временных изменений атмосферного аэрозоля на локальном, региональном и глобальном уровнях.

2. Создан архив экспериментальных данных по различным характеристикам атмосферного аэрозоля и метеорологических полей в периоды мониторинга как база для проведения математического моделирования.

3. Разработаны математические модели для описания закономерностей распространения атмосферных аэрозолей и оценки зон влияния их источников, а также методы оптимизации системы мониторинга.

4. Проведены вычислительные эксперименты, показавшие высокую эффективность комплексного подхода к решению задач такого типа.

Полученные результаты позволяют определить направление дальнейших исследований, связанное с необходимостью использования современных технологий геоинформационных систем.

Список литературы

- [1] Куценогий К. П. Проект Аэрозоли Сибири. Первые результаты. *Оптика атмосферы и океана*, **7**, №8, 1994, 1015–1021.
- [2] Куценогий К. П. Мониторинг атмосферных аэрозолей Сибири. *Там же*, **9**, №6, 1996, 704–711.

- [3] Шокин Ю. И., Ривин Г. С., ХАКИМЗЯНОВ Г. С., ЧУБАРОВ Л. Б. Вычислительный эксперимент как инструмент для исследования природных явлений. *Вычислит. технологии*, **1**, №3, 1992, 12–33.
- [4] КУЦЕНОГИЙ П. К., МАЛДЕРЕН Х. ВАН, ХООРНАЕРТ С., ГРИКЕН Р. ВАН и др. Сибирская дымка. Комплексные исследования аэрозолей в Сибири. *Оптика атмосферы и океана*, **9**, №6, 1996, 712–719.
- [5] KOUTSENOGII P. Aerosol measurements in Siberia. *Atmospheric Research*, **44**, No. 1–2, 1997, 167–173.
- [6] КУЦЕНОГИЙ К. П., КУЦЕНОГИЙ П. К. Мониторинг химического и дисперсного состава атмосферных аэрозолей в Сибири. *Химия в интересах устойчивого развития*, №5, 1997.
- [7] СМОЛЯКОВ Б. С., ПАВЛЮК Л. А., КУЦЕНОГИЙ К. П. и др. Особенности формирования ионного состава атмосферных аэрозолей и осадков на юге Западной Сибири. *Там же*, №5, 1997, 193–199.
- [8] Аэрозоли Сибири. Тематический выпуск. *Оптика атмосферы и океана*, **7**, №8, 1994.
- [9] Аэрозоли Сибири. Тематический выпуск. *Там же*, **9**, №6, 1996.
- [10] Аэрозоли Сибири. Тематический выпуск. *Там же*, **10**, №6, 1997.
- [11] КУЦЕНОГИЙ К. П., КОВАЛЬСКАЯ Г. А., СМИРНОВА А. И. и др. Рентгенофлуоресцентный метод с использованием синхротронного излучения для многоэлементного состава аэрозолей. *Там же*, **10**, №7, 1997, 820–827.
- [12] *Atmospheric aerosol in the Asian part of the former Soviet Union. Final report to INTAS. Project 93–0182. 1.4.1995–31.3.1996. University of Antwerp, Belgium, 1996.*
- [13] *Atmospheric aerosol in the Asian part of the former Soviet Union. Periodic report to INTAS. Project 93–0182-ext. 1.6.1996–31.5.1997. University of Antwerp, Belgium, 1997.*
- [14] Ривин Г. С. Численное моделирование фоновых атмосферных процессов и проблема переноса аэрозолей в Сибирском регионе. *Оптика атмосферы и океана*, **9**, №6, 1996, 780–785.
- [15] Ривин Г. С., КУЦЕНОГИЙ К. П., КЛИМОВА Е. Г. и др. Модели для описания метеополей и полей концентраций газообразных и аэрозольных примесей в Сибирском регионе. *Там же*, **10**, №6, 1997, 610–615.
- [16] КУЦЕНОГИЙ К. П., РАПУТА В. Ф., КРЫЛОВА А. И. Планирование и анализ наблюдений в задачах оценивания зон влияния и параметров источников загрязнения атмосферы. *Там же*, **9**, №6, 1996, 786–791.
- [17] РАПУТА В. Ф., КРЫЛОВА А. И. Задача оценивания суммарной мощности источников загрязнения атмосферы. *Там же*, 792–799.

- [18] RIVIN G. S., KLIMOVA E. G. Assimilation system, atmospheric modelling and ecological problems for the Siberian region using NCEP Reanalysis data. In: *Proc. of the first WCRP international conference on reanalyses (Silver Spring, Maryland, USA, 27–31 october 1997)*, 1998, WCRP–104 (WMO/TD-No. 876).
- [19] РИВИН Г. С., КЛИМОВА Е. Г., ВОРОНИНА П. В., КУЛИКОВ А. И. Оценка влияния фактических и климатических метеоусловий на картину распространения аэрозолей в Сибирском регионе. *Оптика атмосферы и океана*, **11**, №6, 1998, 561–566.
- [20] РИВИН Г. С., ВОРОНИНА П. В. Перенос аэрозоля в атмосфере: выбор конечно-разностной схемы. *Там же*, **10**, №6, 1997, 623–633.
- [21] RIVIN G. S., KOUTZENOGII K. P., VORONINA P. V. Transport passive and gaseous pollutants in Siberian region. *J. Aeros. Sci.*, **28**, Suppl. 1, 1997, S467–S468.
- [22] РИВИН Г. С., ВОРОНИНА П. В. Перенос аэрозоля в атмосфере: имитационные эксперименты. *Оптика атмосферы и океана*, **11**, №7, 1998.
- [23] KALNAY E., KANAMITSU M., KISTLER R., COLLINS W., DEAVEN D., GANDIN L., IREDELL M., SAHA S., WHITE G., WOOLLEN J., ZHU Y., CHELLIAN M., EBISUZAKI W., HIGGINS W., JANOWIAK J., MO K. C., ROPELEWSKI C., WANG J., LEETMAA A., REYNOLDS R., ROY JENNE, DENNIS JOSEPH. The NCEP/NCAR 40-year Reanalysis project. *Bull. Amer. Meteorolog. Soc.*, **77**, No. 3, 1996, 437–471.
- [24] КУЦЕНОГИЙ К. П., КИРОВ Е. И., КНОР И. Б. и др. *Пестициды в экосистемах: проблемы и перспективы. Сер. “Экология”*. Вып. 33, СО РАН, ГПНТБ, ИХКиГ, ИСЭЖ, ВЦ, Новосибирск, 1994.
- [25] КУЦЕНОГИЙ К. П. *Экспериментальные и теоретические исследования распространения и осаждения аэрозолей в турбулентном потоке*: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Новосибирск, 1983.
- [26] *Оптимальная аэрозольная технология применения пестицидов: Сб. науч. тр. ИХКиГ СО РАН*. Новосибирск, 1989.
- [27] КУЦЕНОГИЙ К. П. Экспериментальные и теоретические исследования распространения и осаждения аэрозолей на растительность и почву. В *“Поведение пестицидов и химикатов в окружающей среде”*. ГИМИЗ, Л., 1991.
- [28] SAMSONOV Y. N., MAKAROV V. I., KOUTZENOGII K. P. Evaporation kinetics of pesticide constituents from the mixture of polydisperse multicomponent aerosols. *J. Aeros. Sci.*, **26**, Suppl. 1, 1995, 523–524.
- [29] САМСОНОВ Ю. Н., МАКАРОВ В. И., КУЦЕНОГИЙ К. П. и др. Математическое моделирование и полевые экспериментальные измерения первичных и вторичных воздушных сносов при различных методах их применения. *Химия в интересах устойчивого развития*, **4**, №2, 1996, 139–148.
- [30] SAMSONOV Y. N., MAKAROV V. I. Kinetics and Photophysical Mechanism of Sunlight Photolysis of Unstable Resmethrin and Phenothrin in Aerosols and Thin Films. *Bull. Environmental Contamination and Toxicology*, **56**, No. 6, 1996, 903–910.

- [31] MAKAROV V. I., SAMSONOV Y. N., KOROLEV V. V., KOUTSENOGII K. P. Measurements of the contents of organic and inorganic carbons, 3,4-benzo(a)pyrene, and dibutyl phtalate in atmospheric aerosols in West Siberia. In *"Nucleation and Atmospheric Aerosols"*. Eds. By M. Kulmala and P. E. Wagner. Pergamon, 1996, 714–717.
- [32] МАКАРОВ В. И., САМСОНОВ Ю. Н., КОРОЛЕВ В. В., РАПУТА В. Ф. Измерение 3,4-бенз(а)пирена в аэрозолях атмосферы и в ветровом створе от дымовых труб тепловой станции и использование метода математического моделирования для прогноза локального и регионального переноса примеси. *Оптика атмосферы и океана*, **9**, №6, 1996, 837–842.
- [33] MAKAROV V. I., ANKILOV A. N., KOUTZENOGII K. P. ET AL. Efficiency of the inertial wind capture of pesticide aerosols by vegetation species. *J. Aeros. Sci.*, **27**, Suppl. 1, 1996.
- [34] КИРОВ Е. И., САМСОНОВ Ю. Н., МАКАРОВ В. И. и ДР. Применение регуляторов роста растений и микроэлементов в оптимальной аэрозольной технологии. *Агрехимия*, №10, 1996, 84–94.
- [35] SAMSONOV Y. N., MAKAROV V. I. Photodecomposition of pesticide constituents in aerosols and thin films. *J. Aeros. Sci.*, **28**, Suppl. 1, 1997, 619–620.
- [36] КУЦЕНОГИЙ К. П., КОВАЛЬСКАЯ Г. А., СМИРНОВА А. И. и ДР. Химический состав атмосферных аэрозолей на севере Западной Сибири. *Оптика атмосферы и океана*, **11**, №6, 1998, 625–631.

Поступила в редакцию 15 мая 1998 г.