

Диагноз экстремальных концентраций формальдегида в г. Томске на основе численного моделирования

В.А. Шлычков¹, Т.С. Селегей², В.М. Мальбахов³, А.А. Леженин^{3*}

¹Институт водных и экологических проблем СО РАН, Новосибирский филиал
630090, г. Новосибирск, Морской пр., 2

²Сибирский региональный научно-исследовательский гидрометеорологический институт
630099, г. Новосибирск, ул. Советская, 30

³Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6

Поступила в редакцию 25.11.2009 г.

Представлена численная модель для реконструкции поля загрязнения пограничного слоя атмосферы формальдегидом. Модель адаптирована к природно-географическим условиям г. Томска. Проводится оптимизация параметров уравнения переноса и диффузии примеси для обеспечения адекватности расчетных характеристик. Ветровой режим орографически неоднородной территории воспроизводится с помощью однослойной гидродинамической модели при условии устойчивой стратификации приземного слоя. Результаты расчетов дают представление о распределении экстремальных концентраций формальдегида по территории города и окрестностей. Проведена оценка относительного вклада выбросов автотранспорта в общее загрязнение городской атмосферы.

Ключевые слова: гидродинамическая модель, перенос примеси, сложный рельеф, методы оптимизации; hydrodynamic analysis, pollution transport, combined relief, optimization problem.

Введение

Проблема загрязнения атмосферы формальдегидом остро стоит во всех крупных городах РФ, причем в Сибири формальдегидная нагрузка в 2 раза выше, чем в целом по стране, а среднегодовые концентрации составляют 5 и более ПДК [1]. Формальдегид является токсичным веществом 2-го класса опасности, обладает канцерогенным действием и негативно влияет на центральную нервную систему человека.

Основными источниками поступления формальдегида в атмосферу являются предприятия нефтехимии, деревообработки, производства пластмасс, котельные, автотранспорт. Вторичными источниками служат различные углеводородные соединения (метан, этилен, и др.), которые в результате фотохимических реакций преобразуются в формальдегид.

В г. Томске имеется 6 стационарных постов наблюдений, на которых проводится контроль за содержанием формальдегида (положение постов можно видеть на рис. 1, а). Для анализа закономерностей формирования концентраций обработаны ряды наблюдений по постам за период 2003–2007 гг.

Полученная информация разбита на 3 группы: а) благополучное экологическое состояние городского воздуха; б) повышенная концентрация формальдегида, когда на отдельных постах регистрировалось превышение среднесуточных значений ПДК (ПДК_{сс}); в) экстремальные ситуации, когда не менее чем на 3 постах фиксировалось превышение мгновенных разовых ПДК (ПДК_{м.р.}, превышающая ПДК_{сс} более чем в 10 раз).

Диагноз экстремальных ситуаций группы «в» представляет наибольший практический интерес и в данной статье является предметом исследований.

Таблица показывает, что экстремальные концентрации в Томске формируются сравнительно редко – за 5-летний период обнаружено 168 дней, так что вероятность p (вероятность события) составила около 0,09. Наибольшее число случаев пришлось на летние месяцы. Градация дней с высоким загрязнением по направлениям высотного ветра показала, что максимум случаев соответствует ветрам юго-западного сектора. Во всех случаях сила ветра у земли не превышала 2 м/с.

Анализ данных наблюдений в отдельных точках города не дает полной информации о характере распределения формальдегида по территории. Обычно применяемая для целей нормирования выбросов модель ОНД-86 [2] заметно искажает значения концентрации по отношению к фактически наблюдаемым, а вопрос ее применимости к орографически неоднородной местности (в частности, для г. Томска) остается открытым.

* Вячеслав Александрович Шлычков (slav@ad-sbras.nsc.ru); Тамара Семеновна Селегей (bykov@sibnigmi.lvs.ru); Виталий Магомедович Мальбахов (mvm@ommfao1.sccc.ru); Анатолий Александрович Леженин (lezhenin@ommfao.sccc.ru).

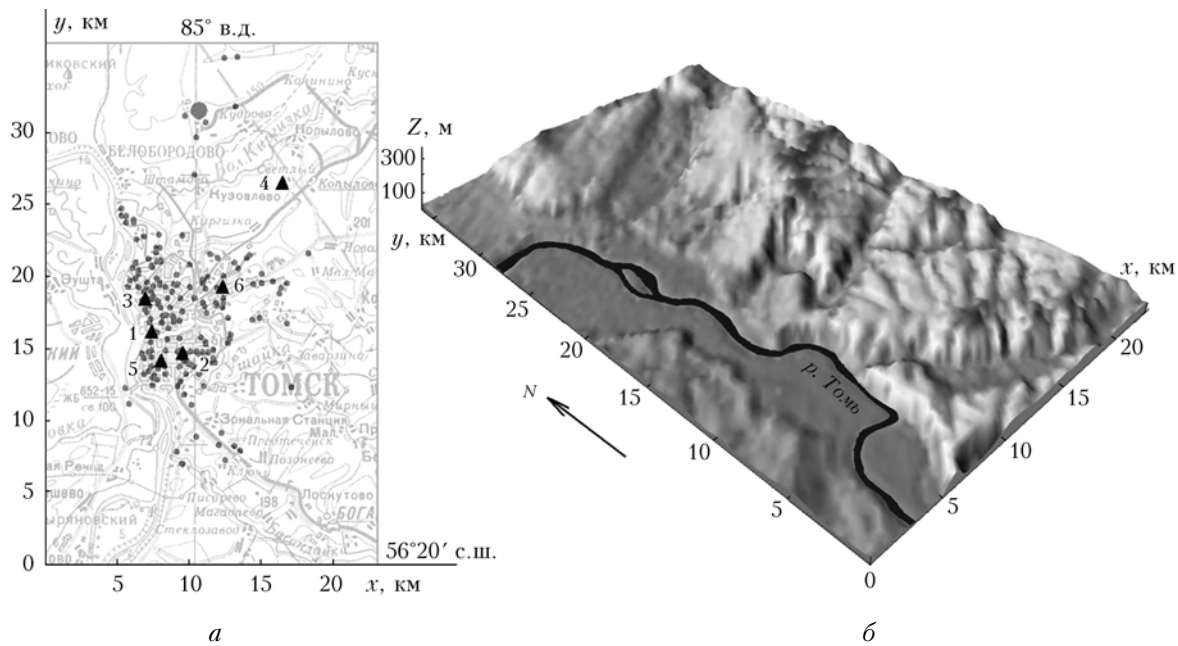


Рис. 1. Система координат, положение источников эмиссии (отдельные точки) и постов наблюдений 1–6 (треугольники) в городе (а); рельеф территории (б)

Число дней в году с экстремально высокими концентрациями формальдегида

Год	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII	Итого
2003	2	1			1	4	5	3	5			1	22
2004					4	4	9	8	7	1		1	34
2005					1	12	8	4	1			1	27
2006				8	3	2	2		5		2		22
2007					2	5	15	17	14	5	2	3	63
Итого	2	1		8	11	27	39	32	32	6	4	6	168

Цель данной работы заключается в реконструкции полей концентрации формальдегида в г. Томске на основе численной модели с использованием данных наблюдений при различных метеорологических ситуациях. Это требует решения следующих задач:

- создание базы данных по источникам валовых выбросов в городе с учетом химических превращений углеводородных и органических соединений в формальдегид;
- идентификация параметров численной модели переноса примеси для обеспечения адекватности расчетных и фактически наблюдаемых концентраций;
- детализация ветрового режима над городом с учетом орографической неоднородности территории;
- построение среднегодовых полей экстремальных концентраций путем осреднения по румбам розы ветров.

Модель переноса формальдегида

В горизонтальной плоскости введем декартову прямоугольную систему координат (x, y, z) , в которой ось x направлена на восток, ось y – на север,

а ось z – вертикально вверх. Определим область решения как

$$0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad \delta \leq z \leq h,$$

где $L_x = 23$ км, $L_y = 36$ км – размеры области, включающей г. Томск с окрестностями (рис. 1, а); функция $\delta(x, y)$ описывает рельеф местности (рис. 1, б); h – верхняя граница расчетной области.

Для расчета распределения формальдегида по территории использовалось уравнение переноса и диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial c}{\partial z} + J, \quad (1)$$

где c – искомая концентрация; u, v – компоненты горизонтальной скорости ветра; K_x, K_y, K_z – коэффициенты турбулентной диффузии; J – интенсивность источников эмиссии.

Крайевые условия на боковых границах задавались в виде

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0 \text{ при } u_n > 0, \quad c = 0 \text{ при } u_n \leq 0, \quad (2)$$

где n — направление внешней нормали; u_n — нормальная скорость на границе. По вертикали принято

$$\frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ при } z = \delta, \quad K_z \frac{\partial c}{\partial z} = -\alpha_g c \text{ при } z = h, \quad (3)$$

где α_g — декремент затухания профиля концентрации на высотах, полученный из формул гауссова факела [3]. В качестве начальных условий принято $c = 0$.

Метод решения задачи (1)–(3) основан на дискретизации уравнения (1) в сеточной области. По горизонтали используется равномерная прямоугольная сетка с узлами, разнесенными по граням элементарного пространственного бокса [4]. Аппроксимация операторов адвекции выполнена на основе TVD-схемы (Total Variation Diminishing) с невозрастанием полной вариации, гарантирующей монотонность решения. При интегрировании по времени применяется неявная схема расщепления, при этом TVD-части алгоритмизировались в соответствии с методом [5]. Пространственное разрешение модели определяется шагами $\Delta x = \Delta y = 200$ м.

Инвентаризация источников эмиссии показала, что в городе имеется 65 предприятий с прямым выбросом формальдегида разной интенсивности, около 100 с эмиссией углеводородов, ряд магистральных дорог и перекрестков (учтены 40 участков дорог). Эта информация использовалась при формировании функции $J(x, y, z)$ в (1). В целом консолидированный объем валовых выбросов составляет 106 т/год. Источник с максимальной мощностью 48 т/год (нефтехимический комбинат) расположен к северу от города ($y \approx 31$ км на рис. 1, а).

В сформулированной модели имеется ряд свободных (неопределенных) параметров. Вариация параметров так или иначе влияет на перераспределение концентрации в пространстве. Например, при увеличении скорости адвекции факел от отдельно взятого источника становится узконаправленным, а концентрация в нем уменьшается. При увеличении коэффициентов диффузии доминируют эффекты рассеяния, а ширина факела, напротив, возрастает; определенным образом будут меняться и расчетные значения c в точках наблюдения. Это обстоятельство дает возможность целенаправленно подобрать параметры модели так, чтобы максимально приблизить расчетные концентрации к наблюдаемым и тем самым провести калибровку по натурным данным. В качестве варьируемых величин использовались два параметра: модуль скорости ветра из диапазона 0,1–1 м/с и коэффициенты диффузии K_x, K_y (в численных экспериментах полагалось $K_x = K_y$). Смысл параметров K_x, K_y в данном контексте отличается от традиционно принятого — они отражают не степень турбулизации воздушной среды, а меру неопределенности направлений ветра в диапазоне штилевых значений.

Предполагалось, что развитие экстремальных ситуаций может быть связано с направлением атмосферного переноса. Поэтому данные таблицы были разбиты по 8 секторам круга ветров и расчеты вы-

полнялись в соответствии с градацией данных по направлениям. При проведении оптимизации формировался функционал ошибок

$$\Phi = \sum_{n=1}^6 |c_n^{fact} - c_n^{calc}|, \quad \Phi \rightarrow \min, \quad (4)$$

где c_n^{fact} — фактическая концентрация на постах, усредненная по всем реализациям на данном направлении; c_n^{calc} — расчетные значения c , спроецированные из сеточных узлов в точки местоположения постов (для сопоставления использовался уровень измерений $z = z_2$, соответствующий 2-метровой высоте над поверхностью). Искомым считалось решение $c(x, y, z)$, на котором функционал (4) достигает минимального значения из всех возможных.

Уравнение (1) интегрировалось по времени до момента выхода решения на стационарный режим. Ввиду высокой ресурсозатратности трехмерной модели целесообразно исследовать чувствительность и определить «вилку» оптимальных значений параметров в упрощенном варианте задачи, когда влияние рельефа не учитывается ($\delta = 0$). В этом случае ветер считается квазигомогенным по территории, а его вертикальный профиль рассчитывается из модели приземного слоя [6], в которой город параметрически учтен увеличенным значением шероховатости.

Минимизация двухпараметрического функционала для каждого из 8 румбов проводилась методом градиентного спуска: при фиксированном значении K_x, K_y изменялась скорость переноса в направлении убывания Φ . Характер зависимости Φ от скорости переноса иллюстрирует рис. 2, а, из которого видно, что оптимальное значение скорости в данном случае близко к 0,42 м/с, причем с увеличением $|u|$ ошибка быстро возрастает. (Оптимальные значения во всех случаях не превышали 0,7 м/с, что подтверждается фактом формирования высоких концентраций лишь в условиях, близких к штилевым.)

Найденный оптимум скорости фиксировался и служил отправным значением для продолжения оптимизации по коэффициентам диффузии. Описанная процедура циклически повторялась до момента нахождения оптимальной совокупности с заданной точностью. Диаграмма на рис. 2, б показывает концентрации, полученные в отдельных численных экспериментах расчетного цикла. Последняя колонна в каждой группе показывает измеренную концентрацию на каждом из 6 постов, стоящие впереди столбики характеризуют модельную концентрацию в приближающих расчетах.

Для получения оптимальных сочетаний параметров при минимизации ошибок проводилось до нескольких десятков пробных расчетов для каждого из 8 направлений ветра. Набор данных сохранялся для последующего использования при решении полной задачи.

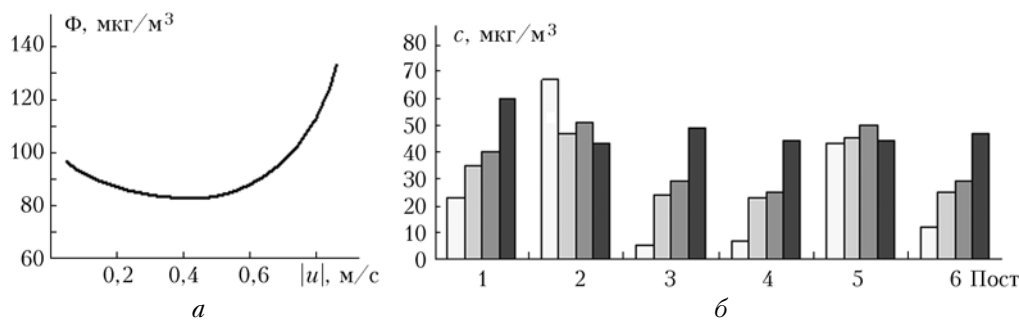


Рис. 2. Изменение функционала ошибок Φ при вариациях скорости (*a*); расчетные концентрации на постах в последовательности оптимизирующих экспериментов при юго-западном ветре (*б*)

Модель ветрового режима

Правый берег р. Томь, на котором расположена основная часть города, имеет сложную орографическую структуру — долины речных притоков формируют пересеченный рельеф с перепадами высот до 150 м. Небольшая речка Ушайка, впадающая в Томь, глубоким каньоном делит правобережную часть города на две части. Заметная впадина образована и другим притоком — Большой Киргизкой, расположенным к северу. Ряд внегородских долин также формируют понижения рельефа в поперечном к руслу Томи направлении (см. рис. 1, б). В силу значительной орографической неоднородности подстилающей поверхности скоростная структура потока не является постоянной в плане, а деформируется за счет эффектов обтекания и подлежит расчету в рамках динамической модели.

Для нижних слоев атмосферы Томска характерным является устойчивое распределение температуры с высотой. Повторяемость температурных инверсий в Западной Сибири составляет 50–60% [1], практически во все сезоны в Томске наблюдается слой с устойчивой стратификацией и инверсионной прослойкой, которая препятствует вертикальному обмену воздушных масс и переносу примеси в верхнюю атмосферу. Это обстоятельство позволяет пренебречь эффектами вертикального обмена между слоями и рассматривать устойчивый пограничный слой как тяжелую жидкость, расположенную под более легкой жидкостью, а также перейти к однослойной аппроксимации физических процессов.

Структура турбулентного потока над различными типами подстилающей поверхности в настоящее время хорошо изучена экспериментально и теоретически. В приземном слое с высокой точностью выполняются соотношения подобия, согласно которым динамические параметры потока подчиняются автомодельным зависимостям [7]:

$$K_z \frac{\partial u}{\partial z} = c_d |u| u, \quad K_z \frac{\partial v}{\partial z} = c_d |u| v, \quad (5)$$

где c_d — коэффициент трения потока о неровности подстилающей поверхности. Опираясь на факт подобия процессов по вертикали, трехмерную струк-

туру гидродинамических полей аппроксимируем в виде

$$\varphi(x, y, z, t) = \varphi_1(x, y, t) \varphi_2(z), \quad (6)$$

где вектор-функцию φ_2 будем считать безразмерной величиной со структурой, определенной универсальными функциями. Примем толщину устойчивого слоя h в качестве искомой переменной $h = h(x, y, t)$. Уравнение для определения компонентов φ_1 получим путем подстановки (6) в уравнения гидродинамики пограничного слоя атмосферы и их осреднения по вертикали от $z = \delta$ до $z = h$. Отбрасывая индекс «1» у переменных, уравнения движения и неразрывности запишем [8]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial hu}{\partial t} + \frac{\partial hu u}{\partial x} + \frac{\partial huv}{\partial y} = \\ & = -\lambda \Delta T h \frac{\partial(h + \delta)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} h K_x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} h K_y \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_x - c_d |u| u, \\ & \frac{\partial hv}{\partial t} + \frac{\partial huv}{\partial x} + \frac{\partial hv v}{\partial y} = \\ & = -\lambda \Delta T h \frac{\partial(h + \delta)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} h K_x \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} h K_y \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_y - c_d |u| v, \\ & \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial uh}{\partial x} + \frac{\partial vh}{\partial y} = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\Delta T > 0$ — вертикальный перепад температур между устойчивым приземным слоем и вышележащей свободной атмосферой; λ — параметр плавучести; τ_x, τ_y — ветровые напряжения на верхней границе слоя.

Условия на боковых границах области для системы (7) сформулируем в виде

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial v}{\partial n} = 0, \quad h = h_\Gamma \text{ при } (x, y) \in \Gamma^+, \quad (8)$$

где Γ^+ — участки втекания потока в область; h_Γ характеризует среднее (по реализациям) значение толщины устойчивого слоя.

Движущие силы в системе обусловлены касательными напряжениями τ_x, τ_y , которые необходимо задать как независимые внешние параметры. Процедура оптимизации, описанная выше, прово-

дятся теперь в терминах величин τ_x, τ_y , которые регулируют амплитуды скоростей по области и, в частности, на постах наблюдения. Восстановление полей ветра проводилось интегрированием уравнений (7) на установление. На реальном рельефе расчетные скорости заметно отклоняются от постоянных значений и параметры τ_x, τ_y приходилось пересчитывать, т.е. подбирать опытным путем так, чтобы скорость ветра была близка к оптимальной. По сравнению с упрощенным вариантом прямого задания скоростей сложность оптимизации здесь значительно возрастает за счет организации дополнительного временного цикла, обеспечивающего решение задачи (7)–(8).

Трение о подстилающую поверхность c_d определялось в ходе расчета параметров приземного слоя. Необходимые для модели морфометрические данные по исследуемой территории выбирались с 3-секундным разрешением (92,5 м) из сетевых ресурсов и интерполировались на расчетную сетку.

Расчет средней годовой концентрации формальдегида проводился в следующем порядке. Для каждого из направлений ветра решалась система динамических уравнений с некоторыми значениями параметров τ_x, τ_y и рассчитывалось среднее по толщине устойчивого слоя распределение скорости ветра на территории. Трехмерная структура скоростей и коэффициентов вертикального обмена K_z восстанавливалась с помощью универсальных функций модели приземного слоя. Полученные поля использовались как гидродинамическая основа при

интегрировании уравнения переноса и диффузии примеси. Значения концентрации формальдегида подставлялись в соотношение (4) для вычисления текущей ошибки. Последняя сравнивалась с ранее полученными значениями Φ , что позволяло определить вектор градиента в пространстве оптимизируемых параметров и повторить процедуру с обновленными величинами τ_x, τ_y, K_x .

Каждое из 8 направлений ветра характеризовалось собственным набором данных наблюдений c_n^{fact} , оптимальная совокупность параметров также индивидуализирована по румбам. Результирующее поле концентрации представляет собой характерное распределение формальдегидной нагрузки по городу в экстремальных эколого-метеорологических ситуациях, реализация которых возможна с вероятностью, отвечающей доле данного румбового направления в розе слабых ветров. Например, для северного ветра эта вероятность равна 0,054. Важно отметить, что построенные поля согласованы с данными наблюдений, т.е. в точках местоположения постов расчетные значения концентрации совпадают или близки к фактическим.

Если провести весовую суперпозицию 8 частных полей по всему кругу направлений, то получим некоторое среднеождаемое годовое поле концентрации, единое для всех направлений ветра. Рис. 3, а иллюстрирует расчетное распределение среднегодовых экстремальных концентраций в терминах нормированных значений $\bar{c} = c / \text{ПДК}_{cc}$.

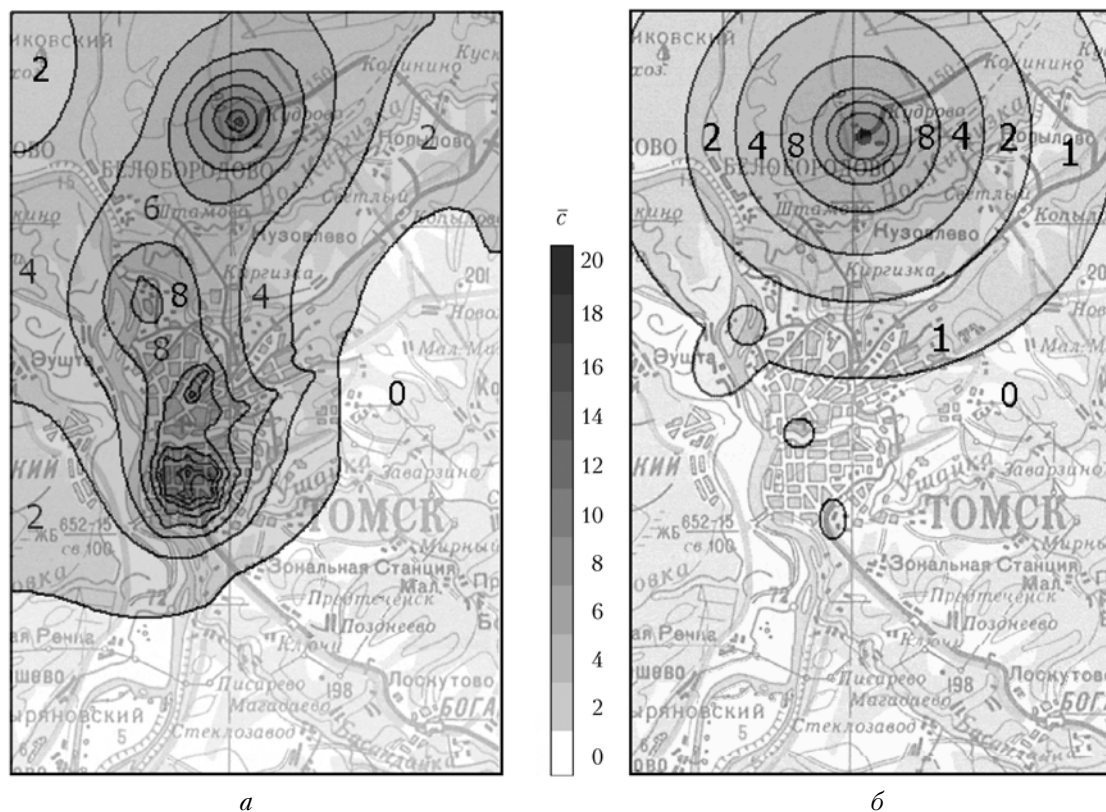


Рис. 3. Расчетное поле среднегодовой концентрации формальдегида (в единицах ПДК_{cc}) на уровне $z = 2$ м (а); поле концентрации, полученное по модели ОНД-86 (б)

Видно, что область влияния основных источников эмиссии покрывает практически всю территорию города, где средняя концентрация изменяется в пределах 5–18 ПДК. Экстремально высокое содержание формальдегида наблюдается в центральной и южной частях города, а также в непосредственной близости от нефтехимического комбината. Шлейф максимальных концентраций вытянут в северном направлении в соответствии с господствующими юго-западными ветрами.

Для сравнения на рис. 3, б построен аналог поля \bar{c} , полученный применением модели ОНД-86 с равными значениями прочих параметров. Видно, что зона влияния источников заметно уменьшилась, понизился и максимум концентраций до значения 8–12 ПДК. Конфигурация шлейфа приобрела гладкий овальный вид, причем геометрический центр овала совпадает с местоположением основного точечного источника. Концентрация формальдегида в городе не превышает значения 0,5 ПДК.

Сопоставляя поля \bar{c} на рис. 3, приходим к выводу, что наличие сложного рельефа вблизи г. Томска обуславливает повышение концентрации формальдегида и приводит к ухудшению экологической обстановки в городе по сравнению с гипотетическим вариантом расположения города на ортографически однородной местности. Унифицированная модель ОНД-86 ориентирована на оценки максимально возможных концентраций на плоскости и дает заметные ошибки (в данном случае – занижение концентрации) при расчетах на сложнопересяеченном рельефе.

Влияние автотранспорта на концентрацию формальдегида в городе довольно велико и по разным оценкам составляет 50–77%. С помощью измерений решить задачу идентификации выбросов автотранспорта невозможно. Применяемые подходы позволяют более обоснованно оценить вклад этого фактора в общий бюджет формальдегидного загрязнения. С этой целью был проведен сценарный цикл расчетов, в которых были учтены только выбросы автотранспорта, а остальные источники эмиссии (предприятия) отключались. С помощью калиброванной выше численной модели получена картина концентрации, обусловленной автотранспортом. Влияние бензиновых выхлопов ограничено чертой города, причем в центральной части концентрация достигает значений 10–12 ПДК_{сс} и оказывается сопоставимой с общим фоном экстремальных ситуаций. По результатам расчетов вклад авто-

транспорта можно оценить в 50–80% по отношению к суммарной концентрации от всех источников, что соответствует данным других исследований.

Заключение

На основе численной гидродинамической модели рассчитано распределение средних экстремальных концентраций формальдегида, выбрасываемого в г. Томске. Калибровка параметров выполнена на основе методов оптимизации и обеспечивает адекватность расчетных характеристик данным измерений концентрации на постах. Полученные оценки содержания формальдегида в городской атмосфере представляются реалистичными в свете литературных данных и фактических материалов.

Возможности модели позволяют получать относительные оценки вклада отдельных предприятий или групп источников (в том числе выбросов автотранспорта) в общее загрязнение городской атмосферы. Алгоритм может быть использован как компонент экспертных систем или систем поддержки принятия управленческих решений, в частности при разработке профилактических мероприятий, способствующих повышению качества воздуха.

1. Селегей Т.С. Формирование уровня загрязнения атмосферного воздуха в городах Сибири. Новосибирск: Наука, 2005. 347 с.
2. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий (ОНД-86). Л.: Гидрометеониздат, 1987. 93 с.
3. Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей. Л.: Гидрометеониздат, 1985. 351 с.
4. Шлычков В.А., Бородулин А.И., Десятков Б.М. Численное моделирование циркуляции воздуха и переноса примеси в городских агломерациях с явным учетом ландшафта // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 19. № 6. С. 552–556.
5. Harten A. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes // SIAM J. Numer. Anal. 1984. V. 21. N 1. P. 1–23.
6. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 256 с.
7. Монин А.С., Яглом А.М. Статистическая гидромеханика. Т. 1. СПб.: Гидрометеониздат, 1992. 694 с.
8. Гутман Л.Н. Введение в нелинейную теорию мезометеорологических процессов. Л.: Гидрометеониздат, 1969. 295 с.

V.A. Shlychkov, T.S. Selegei, V.M. Mal'bakhov, A.A. Lezhenin. Calculation of extreme concentrations of formaldehyde in Tomsk on the basis of numerical modeling.

A numerical model for reconstructing the pollution of the boundary layer of atmosphere by formaldehyde is presented. The model is adapted to the geographical conditions of Tomsk. The parameters of the equation of pollution transfer and diffusion are optimized. The wind field is calculated by a single-layer hydrodynamical model under the condition of stable stratification of the surface layer. Distributions of extreme concentration of formaldehyde over the city and its suburbs are calculated. An estimation of the relative contribution of emissions of motor transport to the total pollution of the city atmosphere is obtained.