

В. И. Наац
И. Э. Наац

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ
В ЗАДАЧАХ
ЭКОЛОГИЧЕСКОГО
МОНИТОРИНГА
АТМОСФЕРЫ



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ®
2010

УДК 519.6:519.21
ББК 22.193+26.233
Н 12

Наац В.И., Наац И.Э. **Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы.** — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 328 с. — ISBN 978-5-9221-1160-7.

В монографии изложены достижения в области математического и численного моделирования нестационарного переноса загрязняющих примесей в пограничном слое атмосферы. Выполняется разработка вычислительных моделей и соответствующих эффективных алгоритмов для задач прогноза переноса и рассеяния аэрозолей, использующих оперативную информацию метеорологического характера.

Книга предназначена студентам, научным работникам и специалистам в области математического моделирования и создания информационно-вычислительного обеспечения систем экологического мониторинга и прогноза, решения других прикладных задач, связанных с охраной окружающей среды.

ISBN 978-5-9221-1160-7

© ФИЗМАТЛИТ, 2010

© В. И. Наац, И. Э. Наац, 2010

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
ГЛАВА 1. Введение в проблему комплексного мониторинга воздушной среды и математического моделирования атмо- сферных процессов	9
1.1. Мониторинг и управление состоянием воздушной среды в пограничном слое атмосферы	9
1.2. Технические средства и методы измерения концентрации аэрозолей в пограничном слое атмосферы. Идентификация аэрозолей по химическому и элементному составу	11
1.3. Атмосферная турбулентность. Натурные измерения турбу- лентных вихревых движений в атмосфере	17
1.4. Методология математического моделирования в задачах экологического мониторинга и прогноза	21
1.5. Проблема совместного использования численных моделей и данных мониторинга. Применение универсальной техноло- гии параллельных вычислений в задачах экологии	32
ГЛАВА 2. Вычислительные методы в физических моделях нестационарного переноса примесей в пограничном слое ат- мосферы	36
2.1. Методы расщепления в нестационарных моделях диффуз- ного переноса газовых и аэрозольных примесей	36
2.1.1. Метод покоординатного расщепления трехмерного уравне- ния переноса (37). 2.1.2. Расщепление уравнения переноса по физическим факторам (44).	
2.2. Методы расщепления в аэродинамических моделях	46
2.2.1. Вопросы математического моделирования в исследовании поля скорости ветра в атмосфере (47). 2.2.2. Вычислительный метод для уравнения Навье–Стокса на основе схемы покоординат- ного расщепления (52). 2.2.3. Второй вариант вычислительного метода с учетом векторного характера исходной математической модели (64).	
2.3. Вариационные методы в моделях эволюционного типа	72
2.3.1. Уравнения эволюционного типа. Операторы шага и источни- ка (72). 2.3.2. Исследование сходимости рекурсивных вычисли- тельных процессов и эффективности конечно-разностных аппрок- симаций для уравнений эволюционного типа (75). 2.3.3. Редук- ция уравнения переноса к системам линейных дифференциальных	

уравнений первого порядка в рамках вариационного подхода (80).	
2.3.4. Метод взвешенной невязки и слабые решения в моделях эволюционного типа (85).	
2.3.5. Вариационный подход к уравнениям эволюционного типа. Регуляризирующие операторы перехода в рекурсивных схемах (89).	
2.4. Метод интегральных уравнений в вычислительной модели явления переноса	92
2.5. Вычислительные модели для оценки коэффициентов турбулентного обмена	95
2.5.1. Обратные коэффициентные задачи для уравнения турбулентной диффузии (96).	
2.5.2. Оценка коэффициента турбулентной диффузии с учетом эмпирических моделей (98).	
ГЛАВА 3. Метод интегральных уравнений и итерационные алгоритмы в моделях переноса	100
3.1. Метод параметризованных моделей в задачах переноса. Выбор исходных данных	101
3.2. Вычислительные схемы на основе конечно-разностного подхода.	109
3.2.1. Сеточные модели на основе явной и неявной разностных схем (109).	
3.2.2. Конечно-разностная аппроксимация производных в граничных узлах сетки. Метод «фиктивной точки» (112).	
3.2.3. Численные исследования сеточных моделей. Тестовый пример «Блок исходных данных» (119).	
3.3. Итерационные методы численного решения задач переноса на основе интегральных уравнений	125
3.3.1. Метод интегральных уравнений. Первая итерационная вычислительная схема метода (125).	
3.3.2. Исследование сходимости итерационного алгоритма (первая итерационная схема) (129).	
3.3.3. Вычислительный алгоритм итерационного метода в параметризованной модели переноса примесей. Результаты программной реализации алгоритма (132).	
3.3.4. Метод интегральных уравнений. Вторая итерационная схема (138).	
3.3.5. Исследование сходимости итерационного процесса (вторая итерационная схема) (141).	
3.3.6. Алгоритмизация второй вычислительной схемы метода интегральных уравнений. Результаты численных исследований (145).	
3.4. Сопоставление конечно-разностных и итерационных алгоритмов. Заключительные выводы и замечания	151
ГЛАВА 4. Вычислительные модели в задачах переноса на основе вариационного подхода	156
4.1. Многочлены Бернштейна и метод наименьших квадратов в вычислительной модели нестационарного переноса примеси	159

4.1.1. Особенности аппроксимации полей исходных данных в задачах переноса многочленами Бернштейна (160).	
4.1.2. Редукция уравнения переноса к системе линейных алгебраических уравнений на основе многочленов Бернштейна. Метод наименьших квадратов в вычислительной модели (165).	
4.1.3. Численная реализация алгоритма (168).	
4.2. Метод взвешенной невязки в вычислительной модели нестационарного параметризованного уравнения переноса . . .	171
4.2.1. Метод конечных элементов в задаче аппроксимации эмпирических данных. Выбор и свойства базисных функций (172).	
4.2.2. Преобразование параметризованного уравнения переноса к системе линейных дифференциальных уравнений на основе метода взвешенной невязки (180).	
4.2.3. Редукция системы линейных дифференциальных уравнений к системам линейных алгебраических уравнений на основе метода Кранка–Николсона и вычислительные методы их решения (189).	
4.2.4. Результаты программной реализации метода и численных исследований (194).	
4.3. Методы минимизации в вычислительных алгоритмах, основанных на вариационных методах	197
4.3.1. Постановка задачи минимизации функций конечного числа переменных (198).	
4.3.2. Модифицированный симплексный метод безусловной минимизации нулевого порядка функции многих переменных (201).	
4.3.3. Модифицированный метод вращения системы координат (205).	
4.3.4. Алгоритмы модифицированных методов — симплексного и вращения системы координат, результаты тестирования (208).	
4.3.5. Применение методов минимизации в вычислительных алгоритмах уравнения переноса (214).	
4.4. Сопоставление рекурсивных алгоритмов, основанных на вариационных методах	217
ГЛАВА 5. Вычислительные модели для пространственных задач переноса и аэродинамики	223
5.1. Вычислительные алгоритмы на основе метода покоординатного расщепления в пространственной задаче нестационарного переноса примесей	224
5.1.1. Метод параметризованных моделей в уравнении переноса для случая трех пространственных переменных (224).	
5.1.2. Неявная разностная схема в модели покоординатного расщепления трехмерного уравнения переноса (227).	
5.1.3. Метод интегральных уравнений в вычислительной схеме покоординатного расщепления уравнения переноса (231).	
5.1.4. Метод взвешенной невязки в вычислительной модели покоординатного расщепления уравнения переноса (244).	
5.1.5. Двумерные модели теории переноса субстанции в пограничном слое атмосферы (250).	
5.1.6. Алгоритмизация вычислительной схемы для двумерного варианта уравнения переноса, результаты численных исследований (255).	

5.2. Построение вычислительных схем на основе метода расщепления для аэродинамической модели пограничного слоя атмосферы	263
5.2.1. Нормирование переменных и функций в уравнении Навье–Стокса. Построение параметризованной модели (264). 5.2.2. Тестовый пример для численной реализации вычислительной схемы аэродинамической модели (268). 5.2.3. Алгоритмизация вычислительной схемы (270). 5.2.4. Постановка и результаты вычислительного эксперимента (281).	
ГЛАВА 6. Качественные модели теории переноса на основе полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии . .	285
6.1. Гауссово приближение решения полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии в задачах переноса загрязняющих примесей	286
6.2. Исследование пространственно-временной изменчивости поля концентрации примесей с учетом влияния метеофакторов	290
6.2.1. Вывод основных расчетных формул и построение алгоритмов для оценки пространственно-временных характеристик распространения загрязняющих веществ (290). 6.2.2. Исследование пространственно-временных характеристик с учетом метеофакторов (293).	
6.3. Исследование динамики распространения загрязнений от системы распределенных точечных источников	299
6.4. Оценка количества аэрозольных примесей в пункте наблюдения, поступающих в него от источника с конечной и непрерывной длительностью действия	302
6.4.1. Вывод основных интегральных формул (302). 6.4.2. Организация и результаты численного эксперимента (305).	
6.5. Обратная задача источника загрязняющих примесей	309
6.5.1. Построение и обоснование регуляризирующего алгоритма для численного решения обратной задачи источника (309). 6.5.2. Вычислительная схема решения обратной задачи источника. Результаты программной реализации и численных исследований (313).	
Литература	317

Предисловие

Вопросам охраны окружающей среды посвящен большой цикл исследований, выполняемых как за рубежом, так и в нашей стране. Практическая значимость этих исследований и соответствующих результатов общеизвестна. Вместе с тем, в рамках этого направления остается ряд сложных в математическом отношении задач, связанных с краткосрочными прогнозами распространения загрязняющих веществ в природной среде, обусловленных, в частности, их аварийным сбросом. Оперативное решение подобных прогностических задач требует разработки нестационарных моделей массопереноса в условиях турбулентной атмосферы и создания численных методов и алгоритмов решения соответствующих математических уравнений и их систем в ограниченных пространственно-временных интервалах. Проблема усложняется необходимостью решения обратных задач массопереноса в природной среде и разработки на их основе теории и методов оперативного контроля состояния природной среды, то есть дистанционного определения ее основных параметров, необходимых для решения указанных прогностических задач. Перечисленные выше вопросы определяют основное содержание научного направления, разрабатываемого, в том числе, в рамках данной монографии. Особенностью проводимых исследований является системный подход к решению проблемы, проявляющийся в единстве разрабатываемых математических моделей с рекомендациями их практического использования в качестве методологической основы соответствующих информационно-измерительных систем экологического мониторинга окружающей среды.

В первой главе выполняется обзор литературных источников по проблеме комплексного мониторинга воздушной среды и математического моделирования атмосферных процессов.

Во второй главе разрабатываются математические модели и методы, и далее на их основе соответствующие вычислительные схемы для задач нестационарного переноса и аэродинамических моделей на основе уравнения Навье–Стокса. Разработка моделей в каждом случае осуществляется в рамках метода расщепления. Рассматривается расщепление покомпонентное, покоординатное и по физическим факторам применительно к трехмерному уравнению переноса, и затем к нелинейному векторному уравнению Навье–Стокса. В главе развивается вариационный подход при построении численных моделей, проводятся аналитические исследования на примере уравнений эволюционного

типа. Кроме этого разработан метод интегральных уравнений и модели для оценки коэффициентов турбулентного обмена.

В третьей главе развивается метод интегральных уравнений, на основе которого строятся итерационные вычислительные схемы для уравнения переноса, выполняется аналитическое и численное исследование свойств вычислительных алгоритмов.

Четвертая глава посвящена вариационным методам построения вычислительных моделей. Основными являются методы взвешенной невязки, конечных элементов и методы минимизации нелинейных функционалов нулевого порядка.

В пятой главе строятся модели для пространственных задач переноса и аэродинамических процессов в рамках метода расщепления. Для двумерной модели переноса выполняются расчеты и численные исследования.

В шестой главе рассматриваются качественные модели теории переноса на основе полужемпирического уравнения турбулентной диффузии. Разрабатываются простейшие методики прогноза экологического состояния воздушного бассейна в пределах промышленного региона, затем они применяются к решению прикладных задач.

Монография предназначена студентам, научным работникам и специалистам в области математического моделирования и создания информационно-вычислительного обеспечения систем экологического мониторинга и прогноза, решения других прикладных задач, связанных с охраной окружающей среды.

ГЛАВА 1

ВВЕДЕНИЕ В ПРОБЛЕМУ КОМПЛЕКСНОГО МОНИТОРИНГА ВОЗДУШНОЙ СРЕДЫ И МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ АТМОСФЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ

1.1. Мониторинг и управление состоянием воздушной среды в пограничном слое атмосферы

Подвергающиеся воздействию антропогенных факторов природные среды представляют сложные взаимодействующие между собой системы. Комплексный мониторинг таких сложных систем складывается из сочетания контактных и дистанционных измерений характеристик практически всегда неоднородных сред, выявления их пространственно-временных зависимостей, а также прогноза возможных состояний этих сред. Активный целенаправленный мониторинг среды предполагает и оптимальное управление контролируемым изменением их состояний. Главной особенностью систем с природными компонентами является их многомерность, неполная предсказуемость их поведения, обусловленная стохастичностью происходящих в них процессов, неопределенностью целей функционирования, неточностью описания их состояния. Это существенно затрудняет проведение натуральных экспериментов с такими системами. Поэтому важную роль в проведении с ними исследований играют их математическое моделирование, проведение численных экспериментов и активный мониторинг, то есть контроль состояния среды, сопровождаемый целенаправленным воздействием на нее.

В работе авторов С.А. Васильева, Л.С. Ивлева и Г.Н. Крылова [19] рассматриваются некоторые вопросы комплексного активного мониторинга природных сред. Комплексный мониторинг состояния неоднородных сред включает в себя сложную систему разномасштабных наблюдений различных характеристик среды с одновременным анализом полученных данных и прогнозом последующего изменения состояния среды. Следует отметить важную роль прямых измерений характеристик природной среды, позволяющих существенно увеличить информативность косвенных дистанционных методов, обладающих преимуществом экспрессного наблюдения изменений состояния

среды в большом диапазоне пространственных масштабов. Глобальный мониторинг проводится с помощью спутниковых наблюдений и сопровождается подспутниковыми локальными и дистанционными измерениями. Методика, аппаратное обеспечение и задачи, выполняемые подобными системами, наиболее полно обсуждаются в работах [38, 141, 22, 47, 73]. Мониторинги регионального и локального масштаба выполняются, в основном, теми же средствами и методами, что и глобальный мониторинг. Все дистанционные методы мониторинга природных сред, предполагают прохождение зондирующего сигнала через воздушную среду, свойства которой либо являются предметом изучения, либо предполагаются известными и учитываются при интерпретации принимаемого от исследуемого объекта сигнала.

Авторами статьи [19] проведен анализ комплексного мониторинга и управления состоянием природных сред. Отмечено, что помимо широко применяемых оптических методов зондирования различных природных сред и прямых методов измерения их физических характеристик желательнее использование методов радиотомографии, особенно в случае мониторинга состояния среды с большими пространственными масштабами и малыми отклонениями характеристик среды от фоновых. Предложены методы дистанционного электромагнитного мониторинга слабовыраженных облачных образований. Проанализированы и предложены методы целенаправленного воздействия на следующие атмосферные процессы: создание конвективных потоков для выноса вредных веществ в более высокие слои с последующим рассеянием этих веществ, образование дождевых облаков, предотвращение возникновения лесных пожаров. Перечислены методы воздействия на физическое состояние околоземного космического пространства, верхней и средней атмосферы. Особый интерес в данном случае представляют дистанционные воздействия с помощью электромагнитных полей: лазерного излучения на озон, мощного радиоизлучения на электроны. Вопросы организации мониторинга, проведения прямых измерений и активного воздействия на состояние воздушной среды посвящен большой цикл исследований [9, 20, 33, 44, 46].

Интересны также работы, рассматривающие интегральные методы исследования слабо выраженных крупномасштабных атмосферных и ионосферных облачных образований [7, 22]. В них предлагается использовать современную импульсно-фазовую радионавигационную систему, работающую по земной волне (отраженная от ионосферы волна мала). Высокая точность измерений основана на наличии у системы атомного стандарта частоты и времени. Как известно, радиолокационные методы исследования имеют широкое применение. Используемая в них длина волны мала по сравнению с размерами образований. Методы позволяют определить границы образований и неко-

торые приграничные характеристики. У радионавигационной системы длина волны сравнима с размерами образований и электромагнитные волны проходят через них. Это позволяет проводить мониторинг структуры, размеров, положения образований в пространстве, оценивать их резонансные характеристики и т. д. Это задача дифракционной томографии облачных образований. Метод может быть использован для мониторинга предвестников землетрясений, радиоактивных выбросов атомных электростанций, аварийных газо-аэрозольных выбросов крупных нефтехимических комплексов. Возможен мониторинг облаков космического мусора, которые обладают магнитными свойствами за счет наличия окислов ферромагнитных элементов и взаимодействуют с геомагнитным полем.

Вопросам мониторинга воздушного бассейна также посвящены исследования, изложенные в работах [45, 137].

1.2. Технические средства и методы измерения концентрации аэрозолей в пограничном слое атмосферы. Идентификация аэрозолей по химическому и элементному составу

Как известно, в процессах образования вторичных аэрозолей, т. е. аэрозолей, образующихся непосредственно в атмосфере, важнейшую роль играют окислы азота, серы и озон. В городских условиях они ответственны за образование смогов: окислы азота с углеводородами при солнечном освещении образуют фотохимический «белый» смог, а окислы серы с частицами сажи — «черный» лондонский смог. В процессах окисления различных соединений азота и серы активно участвуют молекулы озона [41, 152], причем вариации содержания аэрозолеобразующих газов неоднозначно связаны с вариациями содержания аэрозолей. Вследствие этого временные вариации аэрозолеобразующих газов представляют как самостоятельный интерес, так и как показатель процессов аэрозолеобразования.

Для решения ряда прикладных задач хозяйственной деятельности человека, а также некоторых научных проблем физики атмосферы и климатологии необходимы экспресс-оценки и краткосрочные прогнозы загрязненности атмосферы газовыми и пылевыми (аэрозольными) примесями. Если известны мощности основных источников загрязняющих веществ и условия их выброса в атмосферу, то для определенной территории вблизи источников расчет распределения примесей в атмосфере может быть проведен достаточно точно, например, с использованием боксовой схемы [73], в предположении консервативности свойств этих

примесей. Учет физико-химических и химических процессов трансформации примесей в атмосфере несколько усложняет расчеты, но позволяет уточнить оценки содержания загрязняющих веществ и их эволюцию во времени и в пространстве. Следует отметить, что в результате химических реакций загрязняющих веществ друг с другом и с атмосферными газами при солнечном освещении в атмосфере могут образовываться вещества с более вредными для окружающей среды и человека свойствами, чем первоначально выброшенные в атмосферу [157]. Например, в результате окисления диоксида серы образуется серный ангидрид, а затем серная кислота. Еще более опасные соединения возникают при взаимодействии различных углеводородов с окислами азота. Именно эти продукты загрязнения атмосферы принято называть вторичными. Их масса не соответствует массе выбрасываемых изначально в атмосферу загрязнений, которые в ней трансформируются, а несколько больше, в первую очередь, за счет связываемых первичными загрязнениями молекул воды (гидратация, адсорбция и конденсация) и кислорода (окисление). Несколько изменяется и время существования загрязняющих веществ в атмосфере, в основном, в сторону уменьшения из-за процессов нуклеационной генерации аэрозольных частиц, их роста и последующих процессов седиментации и вымывания [157, 44]. Принципиальных трудностей для проведения теоретических оценок концентрации и длительности их присутствия в атмосфере нет. Есть еще другой тип вторичного загрязнения атмосферы. Это вещества, многократно поднимаемые в атмосферу с подстилающей поверхности, в основном адсорбированные на поверхности пылевых частиц, зачастую сильно отличающиеся от своего начального состояния.

В работе Л. С. Ивлева и др. [43] описаны экспериментальные исследования микроструктуры и химического состава аэрозолей приземного слоя атмосферы, подверженного антропогенному влиянию такого мощного промышленного центра, как Санкт-Петербург. Исследования проводятся лабораторией физики аэрозолей НИИФ с начала 70-х годов. Выполнялись, в основном, прямые измерения счетной концентрации и дисперсности аэрозольных частиц с размерами $r > 0,2$ мкм с помощью фотоэлектрического счетчика АЗ-5М, серийных измерений аэрозольным импактором с последующим анализом проб на электронном микроскопе, а также фильтровым заборником с осаждением частиц на полихлорвиниловую ткань Петрянова. В этом случае пробы подвергались ядерно-физическим методам элементного анализа (нейтронно-активационному и рентгенофлуоресцентному), а также ИК-спектральному анализу. Последний давал возможность определить содержание органических компонент и сульфатов. Эти результаты позволили сделать некоторые общие

1.2. Технические средства и методы измерения концентрации аэрозолей 13

заклучения о составе и пространственно-временной структуре приземных аэрозолей на территории города и над юго-восточной частью Финского залива. Кроме этого, проводились измерения содержания монооксида и диоксида азота с помощью хемилюминесцентного газового анализатора Р310.2 производства АО «ОПТЭК». Прибор позволяет измерять концентрации оксидов азота в пределах 1–1000 мкг/м³ с частотой до 10 отсчетов в минуту. По результатам измерений были вычислены средние суточные вариации содержания оксида и диоксида азота отдельно для периода июнь–июль, сентябрь–октябрь и ноябрь–декабрь 1998 года. Далее выполнялись измерения содержания озона в приземном слое атмосферы в Старом Петергофе проводились с осени 1984 года на наблюдательной вышке отдела физики атмосферы НИИ физики с помощью озонметра «Dasibi» совместно с аэрозольными измерениями фотоэлектрическим счетчиком АЗ-5. Результаты этих измерений приведены в ряде работ [2]. В 1998 году измерение содержания атмосферного озона проводилось на станции комплексного экологического мониторинга в период с января по апрель. Концентрации озона определялись посредством хемилюминесцентного озонметра «ЛОЗА-11» производства АО «ОПТЕК», для которого возможные пределы измерения 1–1000 мкг/м³ с относительной погрешностью измерения на всем диапазоне не более 20%, дискретность отсчета по уровню концентрации — 1 мкг/м³. Первичные измерения проводились с интервалом 10 минут. В статье [43] рассмотрены некоторые результаты исследований микроструктуры и состава аэрозолей приземного слоя атмосферы. Часть из них представлена в табл. 1.

В 1996–98 гг. в рамках экспериментов TROICA (Transcontinental Observations in Chemistry of the Atmosphere), организованных Н. Ф. Еланским и П. Крутценом, Г. И. Горчаковым и др. [31] проводились исследования пространственного распределения характеристик приземного аэрозоля с помощью вагона-лаборатории над континентом Евразии вдоль Транссибирской магистрали. В июле–августе 1996 г. (TROICA-2) на трассе Киров–Владивосток и Владивосток–Москва выполнялись измерения функции распределения частиц по размерам, а в феврале–марте 1997 г. (TROICA-3) и в апреле–марте 1998 г. (TROICA-4) — измерения массовых концентраций сажевого и субмикронного аэрозоля. Массовая концентрация сажевого аэрозоля определялась с временным разрешением 1 час, а массовая концентрация субмикронного аэрозоля — с разрешением 10 с. Результаты исследований систематизированы и обобщены в работах [29–32]. Некоторые результаты показаны в табл. 2 [31].

Таблица 1

Концентрации элементов в пробах атмосферного воздуха и осадков (снега), взятых на южном побережье Финского залива в октябре–ноябре 1997 г.

Элемент	Пробы воздуха, нг/м ³			Пробы снега, мкг/л		
	г. Сосновый Бор 29.10.97	пос. Систо-Палкино 29.10.97	пос. Усть-Луга 3.11.97	г. Сосновый Бор 29.10.97	пос. Систо-Палкино 29.10.97	пос. Усть-Луга 3.11.97
Al	—	—	—	—	—	5000
Si	2360	700	2560	1600	170	74700
S	6730	990	—	690	90	1280
Cl	—	—	—	80	—	140
K	—	—	590	21	7	3080
Ca	645	120	555	569	120	6340
Ti	49	247	118	123	50	860
Cr	—	—	—	10	16	86
Mn	112	95	103	7	4	119
Fe	135	99	340	103	15	6650
Ni	60	—	—	30	15	13
Cu	204	43	125	13	257	58
Zn	41	320	88	35	< 3	55
Br	—	—	—	3	4	—
Se	—	—	23	3	2	—
Rb	6	—	15	2	1	122
Sr	43	20	9	2	1	128
Zr	31	26	485	8	4	103
Pb	80	39	51	6	< 3	63

Примечание. Во всех случаях отобран свежеснеживший снег, но в пос. Усть-Луга — снежная крупа с большим зернистым осадком после выпаривания пробы.

1) Объем прокачанного воздуха составлял 15 м³.

2) Выделяется значительное содержание цинка в пробе воздуха из пос. Систо-Палкино и циркония в пробе воздуха из пос. Усть-Луга, а также повышенное содержание меди в пробе снега из пос. Систо-Палкино.

Таблица 2

Массовые концентрации субмикронного и сажевого аэрозоля, мкг/м³

№	Дата	Маршрут	M _{сажа}		M _{сбм}
			станции	сельская местность	
1	1.04–7.04.97	Вятка–Хабаровск	2,2	0,7	29,3
2	8.04–14.04.97	Хабаровск–Москва	3,7	2,0	31,1
3	17.02–26.02.98	Н. Новгород–Хабаровск	4,8	1,4	40,9
4	1.03–7.03.98	Хабаровск–Н. Новгород	4,7	1,4	39,0

Другой важной проблемой является проблема идентификации аэрозолей разного происхождения. Основные подходы к разрешению данной проблемы и результаты исследований изложены в работе В. К. Донченко и Л. С. Ивлева [34]. В ней, в частности, отмечается, что проблема идентификации аэрозолей разного происхождения обусловлена, в основном, двумя причинами: физико-химические свойства аэрозолей разной природы зависят от механизма их генерации и химического состава аэрозольного вещества; оценки экологического ущерба от присутствия аэрозольных частиц в атмосфере требуют знания характеристик источника аэрозолей и времени их существования во взвешенном состоянии.

Принципиально существуют три способа идентификации природы аэрозольных частиц: 1) идентификация по химическому составу, характерному для источника или по образующимся на веществе, выбрасываемом источником, химическим соединениям; 2) идентификация по характерным морфологическим структурам; 3) идентификация по элементному составу аэрозольного вещества. Эволюция аэрозолей в атмосфере определяется их физико-химическими свойствами и состоянием атмосферы.

Наиболее универсальным методом идентификации источников аэрозолей, однако, является идентификация по элементному составу. Этот способ в ряде случаев оказывается достаточно надежным, если для источника существуют характерные соотношения концентраций некоторых элементов, что позволяет написать простые линейные уравнения и решать систему этих уравнений. В большинстве случаев характерные соотношения концентраций элементов сохраняются или слабо меняются для всего спектра размеров частиц. Для эффективного внедрения этого способа необходим надежный и достаточно полный банк данных по элементному составу возможных источников аэрозолей. В работе [34] проведен анализ элементного состава твердой подстилающей поверхности, водных поверхностей и атмосферной воды, атмосферных аэрозолей, приведены соответствующие таблицы данных.

Работа Р. Ф. Лавриненко [66] посвящена вопросам формирования химического состава атмосферных осадков. В ней выполнено обобщение данных наблюдений за химическим составом осадков и облачной воды, получены количественные характеристики изменения их состава в пространстве и во времени. Кроме этого в ней, в частности, говорится о том, что систематические исследования химического состава атмосферных осадков были организованы на 13 станциях Европейской территории СССР. На этом этапе было уделено внимание, главным образом, изучению влияния метеорологических факторов на изменение

состава атмосферной воды. Наряду с этим впервые в мировой практике систематическое исследование химического состава воды, взятой из облаков в свободной атмосфере, было проведено в ГГО в 60-е годы на обширной территории страны под руководством О.П. Петренчука. Изучение состава облачной воды позволяет определить химическую природу ядер конденсации. Библиография исследований, проведенных сотрудниками ГГО на основе сетевых и экспедиционных наблюдений за химическим составом атмосферных осадков, облачной воды и аэрозолей представлена в сборнике «Ежегодные данные по химическому составу атмосферных осадков, 1991–1995 гг.» (Санкт-Петербург: Гидрометеоиздат, 1998 г.). В результате анализа и обобщения экспериментальных данных к моменту создания в 1972 г. международной сети фонового мониторинга БАПМОН ВМО был накоплен в нашей стране большой теоретический и практический материал по физико-химическим характеристикам ядер конденсации, аэрозолей и атмосферных осадков, выяснены основные особенности их географических изменений. Программа Глобальной службы атмосферы (ГСА) ВМО обширна. В нее в качестве одного из видов работ включены исследования химического состава осадков, являющегося чувствительным индикатором загрязнения атмосферы. Основная цель международной сети ГСА ВМО — контроль за глобальным уровнем загрязнения атмосферы и выяснение возможных непреднамеренных воздействий человека на климат. Национальная сеть наблюдений за химическим составом осадков в настоящее время решает задачи мониторинга загрязнения атмосферы разного уровня: федерального, регионального и локального. Федеральная сеть включает в себя также станции международной сети ГСА ВМО. Это биосферные заповедники (БЗ) и несколько станций, имеющих длительные ряды наблюдений с 1958 г. или 1962–1966 гг. Однако на фоне 20 глобальных и примерно 300 региональных станций, действующих в настоящее время в системе ГСА ВМО, национальная сеть фонового мониторинга охватывает лишь отдельные разрозненные регионы РФ и не является репрезентативной для ее обширной территории. В течение уже длительного периода эта сеть не развивается ни в качественном, ни в количественном отношении. На протяжении 90-х годов результаты анализа химического состава осадков фоновых станций не представляются в Международный центр данных. Региональная сеть осуществляет мониторинг загрязнения воздуха в промышленных районах. Вопросам идентификации аэрозолей и определению их концентрации в приземном слое атмосферы посвящены также работы [8, 42, 60].

1.3. Атмосферная турбулентность. Натурные измерения турбулентных вихревых движений в атмосфере

В нашей стране были сделаны громадные успехи в области теории мелкомасштабной однородной турбулентности, которая хорошо описывается статистически [59, 68]. Статистическая теория до недавнего времени полностью монополизировала описание процессов атмосферной диффузии [13, 162]. Для крупномасштабной турбулентности разрабатываются теории спиралевидных и солитонных структур. Теория крупномасштабных атмосферных течений вообще не использует представлений о физических свойствах турбулентности [85]. Объединение всех этих процессов под общим термином «атмосферная турбулентность» [4, 68, 159] до последнего времени было чисто формальным. Академик В. В. Струминский однажды сказал, что «турбулентные течения являются самой распространенной формой движения жидкостей и газов». К этому хотелось бы добавить, что основным элементом турбулентных движений являются вихри разных масштабов и разнообразной микроструктуры. Этой позиции придерживается в своих исследованиях С. Л. Васильев. К ней очень близок Дж. Бэтчелор [40]. Проведенный по этой проблеме автором статьи Л. С. Ивлевым [40] анализ научной литературы убедил его, что именно представления о вихревой структуре движений непротиворечиво объединяют различные теории гидродинамических течений и объясняют имеющиеся экспериментальные факты. Анализ проблемы конструирования физической картины движения атмосферных масс [28, 44] позволяет утверждать, что последовательный подход к решению этой проблемы требует признания существования турбулентных вихрей самых разных масштабов и конфигураций, как основных элементов движения атмосферного воздуха. Эти вихри обладают свойствами упругости и деформируемости. При взаимодействии между вихрями действует турбулентное трение, которое влияет на макромасштабные движения воздушных масс. Важнейшим обстоятельством в проявлении этих процессов являются особенности физико-химических свойств молекул воды: значительно меньший молекулярный вес по сравнению с остальными газовыми компонентами, способность к фазовым переходам в атмосфере, большой электрический дипольный момент, своеобразная микроструктура молекулы, способность к кластеро- и клатратообразованию, изменчивость радиационных свойств воздушной среды, содержащей воду в различных фазовых состояниях. Это создает в атмосфере условия для образования макромасштабных структур типа циклонов и антициклонов. На основе общей физической картины движения атмосферных

масс становятся понятными определенные закономерности в их поведении, и возникают возможности прогнозирования этого поведения, в частности, на базе предложенных С. Л. Васильевым закономерностей.

Особый интерес представляет обзор публикаций о натуральных измерениях турбулентных вихревых движений в приземном слое атмосферы [40]. Суть этой проблемы состоит в следующем. Прямые наблюдения поведения турбулентных вихрей в атмосфере являются технически достаточно сложной задачей из-за полидисперсности этих образований и анизотропии их характеристик. Так как для метеорологов и климатологов основное значение всегда имело знание процесса турбулентного обмена, то в первую очередь исследовались вертикальная и в какой-то мере горизонтальная изменчивость характеристик турбулентного обмена и метеорологических параметров, определяющих этот процесс (температура, влажность, давление, ветер и т.д.). Изучение микроструктуры вихрей являлось средством для лучшего понимания атмосферной турбулентности. Только исследования диффузионных процессов и процессов облакообразования наглядно связаны с изучением микроструктуры вихревых образований [41, 87]. Наблюдение факелов от точечных источников неизбежно приводит к представлению о полидисперсности вихрей, их анизотропии и масштабной трансформации, о их пространственно-временной эволюции [18, 41, 138]. Особый интерес для понимания структуры турбулентности имеют наблюдения границ перемещающегося объема диффундирующего вещества, объединения и укрупнения движущихся в одном направлении воздушных объемов, возникновения слоистой структуры аэрозольных образований [67]. Прямые измерения турбулентных образований в приземном и пограничном слоях атмосферы [18] по характеристикам поля турбулентности в последние годы были направлены на изучение спектра размеров вихрей и зон перемежаемости, их эволюции [87]. Наблюдения в приземном слое продольной U и поперечной W составляющих спектра пульсаций скоростей на разных высотах, проведенные Н. Л. Бызовой с сотрудниками [17], позволили им сделать некоторые выводы. Спектр атмосферной турбулентности можно разбить на четыре интервала: энергонесущий, потоконесущий, инерционный и вязкий. Первые два интервала сильно коррелированы по времени и уровню высоты, в них заключается большая часть энергии. В инерционном интервале, где происходит каскадная передача энергии от крупных вихрей к мелким, однородность турбулентности соблюдается только в среднем. Локальный уровень турбулентности, т.е. диссипация ее энергии обладает большой изменчивостью. Наблюдаются вихри (корреляционные структуры) с поперечной осью, в которых отклонения $\Delta U/\Delta Z$ сверху и внизу разного знака. События (наблюдения вихрей)

группируются в отрезках от 12 до 450 с и отсутствуют (зона перемежаемости) в промежутках 200–430 с. Возможны корреляционные структуры с обратным энергетическим каскадом, когда они возникают и растут за счет турбулентности. При температурной неустойчивости выше уровня крупной растительности (хвойные леса) корреляционные структуры меняются — вначале возникают ускоренные нисходящие потоки, а выше замедленные восходящие «взрывы» — аналоги «подковообразных вихрей», наблюдающихся в лабораторных экспериментах, причем даже при условии температурной устойчивости. При отрыве от подстилающей поверхности одного конца такой подковообразный вихрь может образовать смерчеобразный вихрь. Размеры наблюдавшихся в работе [17] корреляционных структур $l = 1 \dots 5$ км. При $V = 2 \dots 10$ м/с это соответствует $\tau = 100 \dots 2500$ с, то есть энергетическому минимуму турбулентности. К корреляционным структурам относятся валики, конвективные термики в отсутствии ячеистой структуры, смерчи и смерчеобразные структуры, крупные вихри, сдвиговые волны Кельвина–Гельмгольца, структуры опрокидывания, внутренние гравитационные волны, структуры, связанные с осадками.

При горизонтальном ветре порядка 10 м/с наблюдались вихревые структуры с поперечной осью на высоте середины мачты $Z = 150$ м с $\Delta U / \Delta Z \approx 0,16 \text{ с}^{-1}$ и масштабом $l \approx 100$ м. При этом отмечалось как замедление скорости воздушного потока при нисходящем движении воздушной массы в зоне перемежаемости между первым и вторым вихрем, так и ускорение — при восходящем движении воздушной массы от подстилающей поверхности, то есть инициирование завихренности с поперечной осью. Наблюдения турбулентности свободной атмосферы при отсутствии облачности или наличии тонких перистых облаков подсказывают, что наиболее интенсивная турбулентность возникает при больших вертикальных градиентах температуры и скорости ветра: вблизи тропопаузы, на холодной стороне струйного течения вместе с подветренными волнами при пересечении струйным течением гор, в области крупномасштабных вертикальных сдвигов ветра, в зонах больших градиентов излучения атмосферы (слои поглощения радиации). Турбулентность, порожденная сдвигом ветра, наиболее интенсивна, когда волны находятся в стадии зарождения или в фазе максимальной амплитуды.

Исследования термической трансформации движущихся воздушных масс при полетах свободных аэростатов позволяют утверждать, что в области неадвективного нагрева наблюдается сходимосť воздушных течений, адвекция холода и роста давления в слое 1–3 км, преобладание нисходящих движений. При неадвективном охлаждении, наоборот, наблюдается расходимосť потоков, адвекция тепла и падение давления, восходящие движения. Для антициклона это соответствует повы-

шению температуры на $1-0,3$ °C/час в передней части молодого низкого антициклона с преобладанием нисходящих движений и охлаждение в тылу. В центре антициклона может наблюдаться как повышение, так и понижение температуры. Для циклона характерен нагрев движущегося воздуха в тылу и нисходящие движения воздушных масс. Наиболее отчетливо выявляется турбулентная структура облачности, в первую очередь, конвективной [126]. В конвективных облаках скорости горизонтальной и вертикальной компонент порядка $15-20$ м/с, с $\bar{\sigma}_U \cong \bar{\sigma}_W = 0,4-0,9$ м/с внутри облаков для Cu-Hum и Cu-Med и $1-2$ м/с внутри облаков Cu-Cong и Cu-Med. Сбоку от Cu $\bar{\sigma}_W$ в два раза больше, над Cu в $3-4$ раза меньше и под Cu в $1,5-2$ раза меньше. Максимальные значения $\bar{\sigma}_{U,W}$ наблюдаются в мощных и быстро растущих облаках. Отношение σ_W/σ_U внутри кучевых облаков — $1,0-1,4$, сбоку — $0,8-0,9$, над облаками — $0,5-0,7$ и под — $0,8-1,1$. Примерное равенство $\bar{\sigma}_W\bar{\sigma}_U$ свидетельствуют о спиральном характере движения воздушных масс. Это, вообще говоря, довольно очевидно: атмосфера стремится перевести вертикально вращающийся вихрь в горизонтальный. При этом наблюдается рост диаметра вихревого образования. По измерениям П. Саундерса скорости роста термиков в облаках получено, что на фиксированной высоте наблюдается четко выраженный верхний предел диаметра термиков, выступающих из развивающегося кучевого облака, причем этот максимальный диаметр D_{\max} растет линейно с высотой: $D_{\max} = b(z - z_0)$, где z_0 — высота зарождения термика, z — высота его вершины, b — коэффициент порядка $(0,35-0,42) \pm \pm 0,05$. Скорость подъема индивидуального термика увеличивается до определенной высоты (в зависимости от его мощности), а затем рост замедляется. Размеры конвективного облака связаны с горизонтальными размерами конвективных ячеек, которые обычно порядка $1-5$ км, но могут быть и выше. Соответственно для одноячейковых Cu диаметр восходящей струи $D_{\text{струи}} = 200-300$ м. Скорость восходящего потока в м/с примерно определяется соотношением $W_{\max} \cong \sqrt{D}\Delta T$, где D — ширина восходящего потока в км, а ΔT — разность температур между основаниями и вершиной облака в км. Наиболее мощная конвективная турбулентность отмечается в тропиках и субтропиках. Скорость восходящих потоков, равная 30 м/с, может наблюдаться до высоты 18 км, а внутри облака достигает 90 м/с.

Экспериментальные исследования перемежаемости спокойной λ_j и турбулентной l_i зон для разных видов облачности свидетельствуют о сильной изменчивости величины λ_j и коэффициента диссипации турбулентной энергии $\varepsilon = \alpha s^{3/2}(k) \cdot k^{5/3}$ (см. табл. 3, [87]).

Таблица 3

Характерные параметры облачности разных типов

Параметр	As-Cs	Ns-As	As	Cs	Ac	Ns-Sc	Sc	KЗ*
l_i , км	20	20	20	30	20	20	20	20
λ_j , км	60	70	30	30	10	10	10	0
$\alpha = l/(\lambda + l)$	0,20	0,20	0,40	0,50	0,90	0,70	0,80	1,0
ε	1,5	3,0		3,0	14,0	8,0	14,0	40
$\Delta\varepsilon$	0,5-6	1,0-5,0		1,0-7,0	8,0-30,0	4,0-16,0	8,0-30,0	20-100

Таблица 4

Характерные параметры слоистообразных и волнистообразных облаков

Параметр	Вне облака	Слоистообразные			Волнистообразные		
		в облаке	над обл.	под обл.	в облаке	над обл.	под обл.
l_i , км	18	24	18	19	23	18	22
λ_j , км	64	31	24	25	9	30	15
α	0,16	0,28	0,25	0,27	0,83	0,30	0,60
ε	2,0	2,2	0,9	2,7	14,0	5,0	6,5

Сходные данные представлены в работе [126] для слоистообразных и волнистообразных облаков (табл. 4). Следует отметить, что совместное движение облаков образует вращающуюся спиралевидную систему — кластер. Это особенно отчетливо проявляется при наблюдениях облачных систем из космоса.

1.4. Методология математического моделирования в задачах экологического мониторинга и прогноза

В работах Г.И. Марчука и его научной школы создана методология математического моделирования, исследованы ее фундаментальные вопросы и разработаны оригинальные конструктивные подходы к изучению циркуляции атмосферы и океана, а также к решению с помощью математических моделей задач прогноза погоды, теории климата и охраны окружающей среды [75–132]. Дальнейшее развитие этого направления, современные достижения в области математического моделирования задач экологии находят свое отражение в работах учеников и последователей академика Г.И. Марчука. В частности, в работе В.В. Пененко [129] изложены некоторые аспекты методологии моделирования, а именно вариационные принципы и методы оптимизации для совместного использования численных моделей и данных мониторинга. По содержанию она представляет развитие работ по методам прямого и обратного моделирования для решения взаимосвязанных задач экологии и климата [129–136].

Содержание этого подхода состоит в следующем. Накопленный в мире опыт решения научных и практических задач природоохранного направления показывает, что математические модели и данные натурных исследований и наблюдательных экспериментов являются равноправными и дополняющими друг друга инструментами для изучения природных процессов. В последние годы в этих исследованиях обозначилась тенденция к расширению набора специальных приборов, с помощью которых производятся наблюдения. Наиболее отчетливо она проявляется при изучении экологически значимых последствий антропогенных воздействий. При этом активно используются методы дистанционного зондирования [114–116, 118–121] в сочетании с различными методами контактных измерений. В результате сбора данных к исследователям попадает разнородная информация, с разных сторон характеризующая наблюдаемые явления. В этом случае естественно возникает задача совместного использования этой информации и математических моделей с целью усвоения данных, восстановления пространственно-временной структуры полей функций состояния, оценки параметров моделей и источников внешних воздействий, диагностики качества моделей и планирования наблюдений. Технологию решения подобных задач дает методика обратного моделирования [135, 136]. Согласно этой методике рассматриваются задачи четырех типов: диагностики, мониторинга, проектирования и прогнозирования. В задачах первых трех типов предполагается наличие фактической информации, распределенной в пространственно-временной области, так что модели в ней могут все время работать совместно с данными. Для их решения строится комбинация методов прямого и обратного моделирования. В задачах четвертого типа обычно задается некоторый момент времени, когда поступление фактической информации об изучаемых процессах «отсекается» и модель начинает работать по времени самостоятельно в режиме прямого моделирования. Но при наличии целевых функционалов и ограничений в прогностических задачах необходимо включать комбинацию прямого и обратного моделирования, чтобы обеспечивать взаимодействие между функционалами и моделями, например через функции чувствительности к вариациям параметров и источников.

Для определенности представляются задачи [128], связанные с оценками характеристик атмосферы с использованием данных дистанционного зондирования и контактных наблюдений за компонентами функций состояния. В этом случае типичной является задача о нахождении распределения температуры и концентраций оптически активных субстанций в атмосфере. Специфика методов дистанционного зондирования состоит в том, что их результаты в общем случае представляют собой значения некоторых функционалов на множестве функций состояния. Они, как правило, недоопределены по

отношению к оцениваемым функциям, т. е. число наблюдений меньше числа внутренних степеней свободы моделей наблюдений в дискретном представлении. Под моделью наблюдений понимается математическое описание преобразования, ставящего в соответствие функции состояния образ той величины, которая измеряется наблюдательным прибором. Возникает вопрос, как ввести дополнительные связи, чтобы уменьшить число внутренних степеней свободы, и тем самым сделать процесс решения обратных задач для моделей наблюдений более корректным. Для этих целей используются в качестве связей математические модели исследуемых процессов и априорные сведения об искомым функциях и оцениваемых параметрах. Естественно, что деление на модели процессов и модели наблюдений чисто условное. Например, модель гидротермодинамики в диагностических и прогностических задачах используется для описания формирования соответствующих процессов в атмосфере. А в обратных задачах усвоения данных наблюдений эта же модель помимо своей основной роли выступает в качестве пространственно-временного интерполянта, т. е. становится элементом модели наблюдений. Модели дистанционных наблюдений также можно использовать для описания процессов распространения излучения в атмосфере. Модель наблюдений можно считать квазистационарной, параметрически учитывающей время, если продолжительность каждого измерения мала по сравнению с шагом дискретизации, принятым в моделях процессов. В этом случае отсчет времени ведется по модели процесса, а результаты наблюдений приписываются к соответствующему интервалу «модельного» времени.

Основные элементы постановки задачи: модели процессов, модели измерений и функционалы для организации методов моделирования и усвоения данных наблюдений. Для описания процессов и их математических моделей вводятся три типа объектов:

- функции состояния $\varphi = \{\varphi_i, i = \overline{1, n\varphi}\} \in Q(D_t, D_{t\nu})$,
- параметры моделей $\mathbf{Y} = \{Y_i, i = \overline{1, n\varphi}\} \in R(D_t, D_{t\nu})$,
- сопряженные функции $\varphi^* = \{\varphi_i^*, i = \overline{1, n\varphi}\} \in Q^*(D_t, D_{t\nu})$.

Функциональное пространство $Q^*(D_t, D_{t\nu})$ сопряжено по отношению к пространству функций состояния $Q(D_t, D_{t\nu})$, $R(D_t, D_{t\nu})$ — область допустимых значений параметров, $D_t, D_{t\nu}$ — области изменения пространственно-временных координат x, t , и частот ν . Структуры функций φ и φ^* идентичны, хотя информационное содержание их различается. Структура областей, выбор системы координат, основные обозначения и их смысл, постановки задач, краевых и начальных условий, описание функций состояния и параметров, структура функционалов, в зависимости от целей исследований, и способы построения интегрального тождества для вариационных формулировок моделей описаны в [129, 132].

С позиций вариационного принципа численные модели являются ограничениями на класс функций и связями между параметрами и функциями состояния. Часть параметров задается по принципу внешнего дополнения и рассматривается как входная информация. Она определяет число внешних степеней свободы. В обратных задачах некоторые параметры являются искомыми и находятся по измеренным данным о функции состояния. Так как они не увеличивают число внутренних степеней свободы в процессе моделирования, их можно рассматривать как внутренние параметры модели. В качестве первого приближения для них задаются их априорные оценки по доступной фактической информации.

В качестве моделей процессов рассматриваются такие модели, как модели гидротермодинамики в климатической системе, модели переноса и трансформации влаги, модели химически и оптически активных загрязняющих примесей в газовом и аэрозольном состояниях [129]. Функции источников в моделях параметрически учитывают действия естественных и антропогенных факторов. Для того, чтобы рассматривать совместно модели процессов и систему мониторинга с целью организации между ними взаимодействия в режиме прямых и обратных связей, предполагается, что все элементы комплекса (т.е. модели и наблюдения) могут содержать ошибки. В этом случае можно ставить вопрос о конструировании алгоритмов для реализации таких связей, исходя из условий минимизации ошибок.

Общую структуру моделей для данного класса задач можно записать в следующей операторной форме:

$$L_0(\varphi) \equiv B \frac{\partial \varphi}{\partial t} + G(\varphi, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \varepsilon = 0, \quad (1.1)$$

где B — диагональная матрица, $G(\varphi, \mathbf{Y})$ — нелинейный матричный дифференциальный оператор, основной элемент в нем — адвективно-диффузионный оператор, действующий на различные компоненты функции состояния; \mathbf{f} — функции источников, ε — ошибки моделей. Операторы переноса в моделях процессов симметризуются с помощью уравнения неразрывности [129]. Все элементы комплекса (1.1) и соответствующих алгоритмических конструкций представлены в работах [129–132]. Здесь рассмотрим только те модели из входящих в состав комплекса моделей климатической системы, которые непосредственно связаны с процессами распространения тепла, излучения и переноса оптически и химически активных субстанций в атмосфере.

1. Модель термодинамики атмосферы

$$L_1(\varphi) \equiv \frac{\partial \pi \theta}{\partial t} + \operatorname{div}(\pi(\theta \mathbf{u} - \mu_\theta \operatorname{grad} \theta)) - \pi Q_\theta - \varepsilon_\theta = 0. \quad (1.2)$$

2. Модели переноса и трансформации влаги и оптически и химически активных примесей в газовом и аэрозольном состояниях

$$L_2(\varphi) \equiv \frac{\partial \pi \varphi_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\pi(\varphi_i \mathbf{u} - \mu_{\varphi_i} \operatorname{grad} \varphi_i)) - \\ - \pi(R_t(\varphi))_i - \pi Q_{\varphi_i} - \varepsilon_{\varphi_i} = 0, \quad i = \overline{1, na}. \quad (1.3)$$

Здесь θ — потенциальная температура, \mathbf{u} — вектор скорости, μ_θ , μ_{φ_i} — коэффициенты турбулентного обмена, π — функция, зависящая от давления, φ_i — отношения смеси для характеристик атмосферной влаги и концентрации примесей в атмосфере, na — общее число субстанций, Q_θ , Q_{φ_i} — источники тепла, влаги и примесей, $(R_t(\varphi))_i$ — операторы, описывающие процессы трансформации, ε_θ , ε_{φ_i} — функции, учитывающие ошибки и меру неопределенностей моделей процессов. Функции θ и φ_i , $i = \overline{1, na}$ включаются в число компонентов функции состояния φ , а μ_θ , μ_{φ_i} , Q_θ , Q_{φ_i} и входные данные начальных и краевых условий — в компоненты вектора параметров \mathbf{Y} .

Если в модели учитывается аэрозолеобразование, то в этом случае добавляется еще одна независимая переменная — размер частиц, и по этой переменной оператор трансформации становится интегро-дифференциальным. Содержательное и конструктивное описание операторов трансформации примесей осуществляется с помощью автоматизированной системы построения кинетических моделей атмосферной химии [177].

Значительные достижения в области математического моделирования атмосферных процессов содержатся в работах А.Е. Алояна и его учеников [1, 2, 132]. В частности, в статье [1] рассматривается математическая модель переноса многокомпонентной примеси с учетом фотохимической трансформации и образования аэрозолей в тропосфере северного полушария с учетом кинетических процессов нуклеации, конденсации и коагуляции. Модель рассматривается применительно к сферической Земле в системе координат (λ, ψ, z) , где λ — долгота, ψ — дополнение до широты, z — высота от подстилающей поверхности. Основные уравнения для скорости изменения концентрации газовых примесей и аэрозолей записываются в следующем виде:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial C_i}{\partial \psi} + \omega \frac{\partial C_i}{\partial z} = \\ = F_{\text{gas}} - P_{\text{nucl}} - P_{\text{cond}} + P_{\text{phot}} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial C_i}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial C_i}{\partial \lambda} + \\ + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial C_i}{\partial \psi}, \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + \frac{u}{a \sin \psi} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \frac{v}{a} \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi} + (\omega - \omega_g) \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} = \\ = F_{\text{aer}} - P_{\text{cond}} - P_{\text{coag}} + P_{\text{nucl}} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \varphi_k}{\partial z} + \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \mu \frac{\partial \varphi_k}{\partial \lambda} + \\ + \frac{1}{a^2 \sin \psi} \frac{\partial}{\partial \psi} \mu \sin \psi \frac{\partial \varphi_k}{\partial \psi}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Здесь C_i , $i = \overline{1, N_g}$, φ_k , $k = \overline{1, N_a}$ — концентрация газовых примесей и аэрозолей; N_g и N_a — число газовых компонент и аэрозольных фракций соответственно; (u, v, ω) — компоненты вектора скорости ветра в направлении (λ, ψ, z) соответственно; ω_g — скорость гравитационного оседания; a — средний радиус Земли; (μ, ν) — коэффициенты турбулентного обмена в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно; F_{gas} и F_{aer} — источники газовых примесей и аэрозолей; P_{nucl} , P_{cond} , P_{coag} , P_{phot} — операторы нуклеации, конденсации, коагуляции и фотохимической трансформации соответственно.

Уравнения (1.4) и (1.5) рассматриваются в области $D_t = G \times \times ([0, T])$, где $G = S \times [0, H]$; $S = \{(\lambda, \psi) : 0 \leq \lambda \leq 2\pi, 0 \leq \psi \leq \pi/2\}$; H — верхняя граница расчетной области.

$$\begin{aligned} \varphi(0, \psi, z, t) = \varphi(2\pi, \psi, z, t), \quad \varphi(\lambda, -\psi, z, t) = \varphi(\lambda + \pi, \psi, z, t), \\ \varphi(\lambda, \pi + \psi, z, t) = \varphi(\lambda + \pi, \pi - \psi, z, t), \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \psi} = 0, \quad \psi = \pi/2. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Для определения коэффициентов горизонтального турбулентного обмена используется метод, предложенный Смагоринским [17]. Метеорологические характеристики в пограничном слое рассчитываются с помощью параметризации планетарного пограничного слоя атмосферы [87, 86, 171]. Краевые условия задачи (1.4)–(1.5) на первом расчетном уровне (на верхней границе приземного слоя атмосферы) $z = h$ и операторы P_{nucl} , P_{cond} , P_{coag} , P_{phot} рассматриваются в работе [1].

В качестве примера приведем вид оператора P_{coag} [1], соответствующего процессу коагуляции. Изменение концентрации и спектра размеров частиц описывается уравнением Смолуховского:

$$\frac{\partial \varphi_g}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_0^g \tilde{K}(g, g_1) \varphi_{g-g_1} \varphi_{g_1} dg_1 - \varphi_g \int_0^\infty \tilde{K}(g, g_1) \varphi_{g_1} dg_1 + I(\varphi_g, t), \quad (1.7)$$

где g_1 — текущая переменная (масса), по которой производится интегрирование; φ_g — концентрация частиц с массой, заключенной в интервале от g до $g + dg$; $\tilde{K}(x, y)$ — частота столкновения частиц с массами x и y ; $I(\varphi_g, t)$ — интенсивность образования новых частиц с массой g . Этот член добавляется в правую часть (1.7). Первый член

в правой части (1.7) описывает приход частиц в размер g за счет коагуляции меньших частиц, второй — уход частиц из размера g за счет коагуляции со всеми остальными частицами. Решение задачи (1.7) определяется на множестве неотрицательных решений. При этом предполагается, что сталкиваются частицы шарообразной формы, и длина свободного пробега в газе-носителе намного больше их размера. В этом случае $\tilde{K}(x, y)$ можно представить в следующем виде [157]:

$$\tilde{K}(x, y) = A(x^{1/3} + y^{1/3})(D_x + D_y)\beta_{xy}, \quad (1.8)$$

где D_x — коэффициент диффузии частицы массы x :

$$D_x = \frac{k_B T}{6\pi\eta R_x} \left[1 + K n_x \left(A + Q \exp\left(-\frac{b_3}{K n_x}\right) \right) \right],$$

k_B — постоянная Больцмана; b_3 , A , Q — эмпирические постоянные; $A = 1,25$, $Q = 0,4$, $b_3 = 1,1$. Фактор коррекции β_{xy} определяется так:

$$\begin{aligned} \beta_{xy} &= \left(\frac{R_x + R_y}{R_x + R_y + d_{xy}} + \frac{4(D_x + D_y)}{(V_x^2 + V_y^2)^{1/2}(R_x + R_y)} \right)^{-1}, \\ d_{xy} &= (d_x^2 + d_y^2)^{1/2}, \\ d_x &= \frac{1}{6R_x l_x} \left((2R_x + l_x)^3 - (4R_x^2 + l_x^2)^{3/2} \right) - 2R_x, \\ l_x &= \frac{8D_x}{\pi V_x}, \\ V_x &= \left(\frac{8kT}{\pi x} \right)^{1/2}, \quad x = \frac{4}{3} \pi R_x^3 \rho. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Здесь D_x — коэффициент диффузии частицы i с радиусом R_x ; T — температура; l_x — средняя длина пробега; V_x — средняя скорость частицы; ρ — плотность частицы; η — вязкость газа. Численные методы решения (1.7)–(1.9) приведены в [2].

Вычислительный алгоритм для решения задачи (1.4)–(1.5) основан на методе расщепления по физическим процессам [78–80, 132]. На каждом малом интервале t получается схема, состоящая из пяти этапов: перенос примеси по траекториям, турбулентная диффузия, фотохимическая трансформация, кинетические процессы нуклеации, конденсации и испарения, процессы коагуляции. Для численного решения адвективного переноса используется численная схема, конечно-разностная аппроксимация которой имеет второй порядок точности по пространственным переменным и времени [36]. На втором этапе уравнение турбулентной диффузии решается по методу покомпонентного расщепления [78, 82]. На третьем этапе задача расщепляется на три

части: фотохимия, конденсация и коагуляция. Уравнения фотохимической трансформации решаются методами ОДУ. На четвертом этапе решается система кинетических уравнений конденсации. Для численного решения уравнений нуклеации, конденсации и испарения используется метод частиц, широко применяемый при моделировании физических процессов в плазме. На пятом этапе решаются кинетические уравнения коагуляции. После дискретизации уравнения (1.7) полученная система решается методом Рунге–Кутты четвертого порядка.

Вопросам математического моделирования теории климата посвящены работы академика В. П. Дымникова и его учеников [35, 36, 84–86]. Так, например, в статье [35] изучаются несколько нелинейных задач физики атмосферы, для решения которых использовалось построение функции Грина. В работе приведены системы уравнений, описывающих крупномасштабную динамику атмосферных процессов. Функция Грина строится в рамках двух методов: метода квазилинеаризации и метода линеаризации. Кроме того, исследуются условия, при которых функция Грина в операторе отклика на малые внешние воздействия диссипативной климатической системы может быть определена через статистические характеристики решения.

Большой цикл работ посвящен решению задач динамики атмосферы и океана [61, 75–86]. Для решения этих задач используются фундаментальные математические методы, такие как метод расщепления и метод сопряженных уравнений, являющиеся основой анализа сложных систем. Значительная роль в создании и развитии этих методов численного анализа и математического моделирования принадлежит академику Г. И. Марчуку. Отметим следующие характерные особенности метода расщепления. Во-первых, процесс решения исходной задачи сводится к решению серии отдельных задач более простой структуры. Реализации метода расщепления присущ модульный принцип: отдельная задача — отдельный модуль. Каждый модуль может иметь свой «сопряженный аналог». Во-вторых, схемы расщепления, основанные на неявной аппроксимации, безусловно, устойчивы. Это дает возможность проводить интегрирование прямой и сопряженной задачи на больших интервалах по времени. В-третьих, каждый модуль может иметь аппроксимацию разного типа и точности. Например, можно комбинировать схемы конечных разностей и конечных элементов; аппроксимировать отдельные задачи с повышенным порядком точности и т. д. Отметим далее, что метод расщепления определен для решения систем уравнений с положительными операторами. Данное свойство должно быть априори установлено для сформулированной задачи. Часто это выражается в нахождении некоторого интегрального инварианта или закона сохранения. Важнейшим моментом формулировки алгоритма расщепления

является разбиение исходной задачи на сумму простых подзадач с положительными операторами. В некоторых случаях выбор такого разбиения является нетривиальным и неединственным. С методологической точки зрения метод расщепления можно рассматривать более широко, формулируя на его основе численную модель сложного физического процесса. Можно обогатить исходную модель за счет включения дополнительных этапов расщепления. Можно изменить исходную модель. Например, после расщепления задачи на цепочку подзадач, можно изменить (упростить или регуляризовать) задачу на отдельном этапе. Методы расщепления и сопряженных уравнений широко используются в настоящее время для решения многомерных нестационарных задач для уравнений с частными производными [146, 127].

Кроме метода расщепления, интерес представляет также метод независимых потоков, предназначенный для численного решения многомерного уравнения теплопроводности (массопереноса) [139, 27]. В работе [27] предложен новый класс численных алгоритмов решения смешанной задачи для многомерного уравнения теплопроводности. Этот класс содержит как схемы первого порядка аппроксимации, так и второго. Все предлагаемые схемы, безусловно, устойчивы. Основным преимуществом данных методов является их абсолютная экономичность. Экономичность алгоритмов, как правило, достигается двумя путями. Первый — наиболее популярный — основан на редукции к одномерным разностным задачам. Именно этот подход лежит в основе метода переменных направлений или, в более общем плане, методе расщепления. Второй подход состоит в использовании тех или иных итерационных процедур. Предлагаемый метод, так же, как и метод расщепления, в своей основе содержит решение одномерных задач. Однако он принципиально отличен от метода расщепления. Во-первых, здесь нет никакой факторизации оператора $(E - \tau \cdot A)$, которая и составляет суть метода расщепления. И, во-вторых, данные схемы по построению являются консервативными, что автоматически гарантирует выполнение дискретного аналога соответствующего закона сохранения. Основная идея алгоритма состоит в способе расчета потоков. Именно неявная разностная схема расчета потоков допускает редукцию к одномерным задачам, что и обеспечивает как безусловную устойчивость, так и экономичность. Следует подчеркнуть, что расчет потоков по каждому из пространственных направлений выполняется независимо, что позволяет легко распараллеливать алгоритм. Именно по этой причине метод можно назвать методом независимых потоков (МНП).

Важные результаты по численному моделированию процессов турбулентности и диффузии примесей в приземном слое атмосферы содержатся в монографии Д. Л. Лайхтмана [68]. В ней автором предлагается замкнутая система уравнений физической модели пограничного слоя

атмосферы и определение на ее основе вертикального профиля продольной составляющей скорости ветра и коэффициента турбулентной диффузии. При этом учитывается особенность пограничного слоя атмосферы, состоящая в том, что в ней имеет место взаимообусловленность распределения метеорологических элементов и характеристик турбулентности, что требует их совместного определения на основе решения замкнутой системы уравнений и граничных условий для пограничного слоя при заданных внешних факторах. Исходя из этого выводится формула для турбулентных потоков различных свойств, необходимая для последующего решения уравнения турбулентной диффузии загрязняющих веществ. Дальнейшее развитие методов математического и численного моделирования явления атмосферной турбулентности и диффузии находит свое отражение в современных работах авторов монографий и статей О. М. Белоцерковного, А. М. Опарина и др. [10–12]. В частности, в работе [11] проведен анализ фундаментальных понятий и методов, необходимых для изучения турбулентности. С помощью новых численных методик проводится прямое численное моделирование свободной развитой турбулентности, при этом получены основные качественные характеристики строения турбулентности на различных режимах движения: когерентные структуры, ламинарно-турбулентные течения, переход к хаосу. В монографии [12] с помощью численного эксперимента рассматривается проблема развития турбулентности и конвекции. На основе полученных результатов предлагается физическая модель развития турбулентности. Обсуждаются численные алгоритмы и разностные схемы, позволяющие проводить численный эксперимент в гидродинамике.

Вопросам математического моделирования явления переноса загрязняющих веществ применительно к проблеме экологического мониторинга окружающей среды посвящен большой цикл работ И. Э. Нааца и его учеников, работающих совместно с ним по данному научному направлению [58, 103, 104, 115–125, 143, 148–151, 163]. Первые результаты И. Э. Нааца были получены в Институте оптики атмосферы Сибирского отделения РАН. Они были связаны с разработкой теории дистанционного оптического зондирования атмосферы в целях прогноза ее оптического состояния, необходимого для различных приложений, включая и контроль уровня загрязнений воздуха в промышленных центрах. Основные результаты этих исследований изложены в монографии «Обратные задачи оптики атмосферы», написанной совместно с академиком РАН В. Е. Зуевым [114]. К этому же циклу работ относятся следующие статьи [115, 116, 118–121]. Дальнейшие исследования теоретического характера по данному направлению получили продолжение в монографии [151], написанной совместно с Е. А. Семенчиным и В. И. Наац. В них кратко рассмотрены физические основы математической модели пограничного слоя атмосферы

применительно к оценке его основных динамических характеристик, необходимых при решении задач переноса загрязняющих веществ в атмосфере. Используемая при этом физическая модель пограничного слоя атмосферы в целом соответствует принятой модели Д. Л. Лайтхмана [67]. На основе системы уравнений, описывающих динамику пограничного слоя атмосферы, разработана структура решающего алгоритма, позволяющего провести оценочные расчеты скорости ветра и коэффициентов турбулентного обмена, необходимых для последующего решения уравнения турбулентной диффузии загрязняющих веществ. В монографии проведен анализ вычислительных схем и, в частности, рассмотрены существование и единственность решений. Для нестационарных задач в математической модели пограничного слоя используется схема Кранка–Николсона, обеспечивающая второй порядок малости. Особое внимание уделено численным методам линеаризации нелинейного уравнения диссипации турбулентной энергии. В работе подробно излагается статистический подход к оцениванию параметров динамической модели пограничного слоя, основанной на взаимосвязи температурной стратификации атмосферы с динамическими характеристиками пограничного слоя. Показана возможность использования в рамках статистического подхода теории марковских процессов для решения прогностических задач. Предложен вычислительный метод для построения матриц переходных процессов, основанный на возможности классификации темпов температурной стратификации в атмосфере. Рассмотрены методы калмановской фильтрации в задачах линейного прогноза динамических характеристик пограничного слоя (компоненты скорости ветра). Показана возможность калмановской фильтрации при решении уравнения турбулентного переноса, в случае, когда коэффициенты последнего содержат случайные ошибки. Разработаны численные модели для нестационарного уравнения переноса на основе вариационных методов, в частности метода взвешенной невязки. Построены на основе метода конечных элементов алгоритмы аппроксимации экспериментальных измерений исходных данных модели переноса, выполнены численные исследования алгоритмов. Получены результаты моделирования распространения загрязняющих примесей в локальном объеме пограничного слоя атмосферы. Продолжение и развитие этих исследований находит отражение в работах В. И. Наац с соавторами [21, 48–57, 89–113, 161]. Последние разработки по данному научному направлению содержатся в данной монографии и будут рассмотрены в последующих главах.

В завершение данного обзора необходимо отметить научные достижения ученых в проблеме моделирования задач экологического мониторинга, полученные под руководством академика В. А. Бабешко (Кубанский государственный университет, г. Краснодар) [29, 30, 165].

1.5. Проблема совместного использования численных моделей и данных мониторинга. Применение универсальной технологии параллельных вычислений в задачах экологии

Важным аспектом методологии моделирования является разработка методов исследования и численного решения задач усвоения данных мониторинга в вычислительных моделях атмосферных процессов. Существуют различные методы для решения подобных задач [127]. В частности, в работе В.П. Шутяева и Е.И. Пармузина [160] рассматривается решение задачи вариационного усвоения данных на основе теории сопряженных уравнений. Основы теории сопряженных уравнений для решения обратных и оптимизационных задач были заложены в ранних работах Г.И. Марчука [80, 81]. Применение метода сопряженных уравнений в [160] выполняется для полулинейного параболического уравнения. На этом примере рассмотрим постановку задачи об усвоении данных.

В обобщенном виде задача об усвоении данных может быть сформулирована следующим образом: найти функцию $\varphi = \varphi(t)$ и управление u , такие, что они удовлетворяют (1.10)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + A(t)\varphi + F(\varphi) &= f, \quad t \in [0, T], \\ \varphi|_{t=0} &= u, \\ S(\varphi) &= \min_u S(\varphi), \end{aligned} \quad (1.10)$$

где A — линейный оператор, определяемый выражением

$$A(t)\varphi = - \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} a_{i,j} \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi + \sum_{i=1}^2 a_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + a\varphi,$$

где $\bar{x} = (x_1, x_2) \in \Omega \subset R^2$, Ω — граничная область с кусочно-гладкой границей $\partial\Omega$, функции $a_{i,j}$, a_i , a удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} a(\bar{x}, t) &\geq 0, \quad \sum_{i=1}^2 \frac{\partial a_i}{\partial x_i} = 0, \quad a_{i,j} = a_{j,i}, \\ \sum_{i,j=1}^2 a_{i,j} \xi_i \xi_j &\geq \gamma \sum_{i=1}^2 \xi_i^2 \quad \forall \xi_i \in R, \quad \gamma = \text{const} > 0. \end{aligned}$$

Оператор A действует из $Y = L_2(\Omega \times (0, T))$ в Y с областью определения $D(A) = \{\varphi: \varphi \in Y; A\varphi \in Y, \varphi|_{\partial\Omega} = 0\}$. Пусть также $f \in Y$,