

С.П. Смышляев, А.В. Дикинис

**МЕТОДОЛОГИЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДИСТАНЦИОННЫХ
ИЗМЕРЕНИЙ ДЛЯ АНАЛИЗА КАЧЕСТВА ВОЗДУХА
В ЗОНАХ ИНТЕНСИВНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ**

S.P. Smyshlyayev, A.V. Dikinis

**A METHODOLOGY FOR REMOTE OBSERVATION USAGE
FOR AIR QUALITY ANALYSIS IN THE POLLUTED REGIONS**

В работе предложена методика численного контроля качества воздуха в зонах интенсивного загрязнения атмосферы путем ассимиляции результатов дистанционных измерений. Методика позволяет рассчитывать величины потоков загрязняющих веществ на основе решения обратной задачи с помощью численной модели химического состава приземного слоя атмосферы.

Ключевые слова: загрязнение атмосферы, дистанционные методы, численное моделирование, обратная задача.

The method to numerically control air quality in the polluted regions using remote sensing data assimilation is proposed. The method allows surface fluxes calculation based on inverse modeling of the boundary layer atmospheric chemical composition.

Key words: atmospheric pollution, remote sensing, numerical modeling, inverse problem.

Введение

Дистанционные методы широко применяются при изучении состава и структуры атмосферы [1]. Преимуществом дистанционных измерений является возможность непрерывного определения средних концентраций загрязняющих веществ по площади, тогда как контактные методы позволяют получать характеристики загрязнений в точке. Однако загрязнение атмосферы от передвижных источников, таких как объекты транспортной инфраструктуры, может происходить в разных точках, что осложняет контроль загрязнений контактными методами.

Контроль уровня загрязнения окружающей среды с помощью систем измерения качества воздуха в зонах интенсивного загрязнения является полезным, т.к. позволяет выделять периоды максимального загрязнения окружающей среды и предлагать меры оперативного реагирования по минимизации опасных воздействий на окружающую среду [2]. Вместе с тем, дополнение местных измерений дистанционными спутниковыми наблюдениями позволит расширить возможности и усилить комплексность методов контроля за состоянием природной среды в зонах воздействия на нее разными видами транспорта. Кроме того, использование систем дистанционных измерений наряду с численными моделями химического состава атмосферы позволит решать не только прямые задачи установления уровня загрязнения природной среды, но также и обратные задачи восстановления местонахождения источников загрязнений по результатам площадных измерений содержания атмосферных газов. При решении

обратной задачи в результате ассимиляции результатов спутниковых измерений численной моделью химического состава атмосферы с привлечением метеорологической информации о температуре воздуха и скоростях и направлении ветра можно определить, является ли наблюдаемый уровень загрязнения результатом местных выбросов, или достигнут в результате атмосферного трансграничного переноса загрязнителей из соседних регионов. В дополнение к этому, использование атмосферной численной химической модели позволяет оценить вклад вторичных, т.е. образующихся в результате химической трансформации первичных продуктов выбросов объектов транспортной инфраструктуры, загрязнителей в отмечаемый дистанционными методами уровень загрязнения.

В настоящей работе предлагаются новые подходы к разработке методов контроля состояния природной среды в зонах интенсивного загрязнения атмосферы с привлечением дистанционных спутниковых измерений содержания атмосферных газов и аэрозоля, их ассимиляции численной моделью химического состава воздуха, решением обратной задачи определения местонахождения источников загрязнения и определения роли вторичных загрязнителей.

Методология объединения дистанционных измерений и численного моделирования

В основе методологии модельного обнаружения загрязнения атмосферы лежит предположение о наличии в качестве исходных данных результатов дистанционных измерений содержания исследуемых газов в форме общего содержания в столбе атмосферы. Тогда можно формулировать задачу разработки методов получения информации о том, какие значения поверхностных эмиссий загрязнителей соответствуют имеющимся результатам измерений, и какая часть этих эмиссий может быть отнесена к имеющим антропогенную природу.

Подобную задачу можно пытаться решать статистическими методами, создавая эмпирические модели зависимости содержания загрязнителей атмосферы от естественных и антропогенных потоков как предикторов и строя регрессионные полиномиальные разложения зависимости содержания атмосферных газов от значений предикторов и далее подбирая значения предикторов, которые соответствуют измеренным значениям [3]. Другой подход заключается в использовании численных моделей, позволяющих на основе математического описания физических и химических процессов, определяющих образование, эволюцию и разрушение загрязнителей в атмосфере, получить информацию о соотношении естественных и антропогенных эмиссий, которые могут привести к наблюдаемым значениям содержания газов [4]. В настоящей работе используется второй подход, т.е. использование численных моделей атмосферы, воспроизводящих реальные условия формирования измеренных концентраций газовых загрязнителей.

Дистанционно измеренные концентрации загрязняющих газов являются результатом взаимодействия пространственно меняющихся источников и стоков и

атмосферного переноса [5]. Следовательно, если стоит задача определения качества воздуха по результатам дистанционных измерений, то необходима модель переноса исследуемых газов. Таким образом, можно определить «обратную задачу» моделирования как проблему определения источников выбросов в зонах интенсивного загрязнения атмосферы на основе результатов дистанционных измерений их содержания [3]. Подобная задача является обратной по отношению к «прямой задаче», когда атмосферная модель используется для диагностики наблюдаемых особенностей, и при этом задаются заранее оцененные источники загрязнителей.

Обратная задача определения источников атмосферных газовых загрязнителей включает: а) организацию сети дистанционных наблюдений представляющих интерес атмосферных составляющих; б) разработку и адаптацию атмосферной модели, описывающей перенос и трансформацию представляющих интерес атмосферных составляющих; в) разработку математических и статистических процедур, позволяющих соотносить результаты измерений и моделирования [6]. При решении обратной задачи важным является определение типов источников и стоков исследуемых загрязнителей. В частности, если решать обратную задачу для инертных загрязнителей с незначительными атмосферными источниками и стоками, то главной проблемой для подобной задачи становится определение знака и величины обмена загрязнителем между атмосферой и подстилающей поверхностью.

С другой стороны, для решения обратной задачи для углеводородных загрязнителей, которые не имеют атмосферных источников, но имеют интенсивные атмосферные стоки, важной проблемой является учет не только их потоков с земной поверхности, но и корректный учет их разрушения химическими процессами в атмосфере. Для многих других газовых загрязнителей, имеющих как источники, так и стоки в атмосфере, таких как, например, угарный газ (СО), при решении обратной задачи восстановления их поверхностных потоков важно учитывать всю совокупность атмосферных химических процессов, приводящих к их формированию и разрушению.

Математическое описание уравнения баланса атмосферной газовой примеси в атмосфере, имеющей источники и стоки можно записать в форме [7]:

$$\frac{\partial N(r,t)}{\partial t} = S(r,t) + T[N(r,t),t], \quad (1)$$

где $N(r,t)$ – концентрация исследуемой атмосферной примеси; $S(r,t)$ – локальный источник, включающий как продукцию, так и разрушение рассматриваемой примеси; $T[N(r,t),t]$ – оператор атмосферного переноса рассматриваемой примеси, включающий, как правило, адвективный и турбулентный перенос газовой или аэрозольной примеси.

Существует два типа обратных задач для определения источников атмосферных газов: дифференциальная и интегральная [4]. При формулировании

дифференциальной задачи уравнение (1) реорганизуется для выделения слагаемого, описывающего локальный источник [3]:

$$\hat{S}(r,t) = \frac{\partial \hat{N}(r,t)}{\partial t} - T[\hat{N}(r,t),t]. \quad (2)$$

При этом в качестве параметров уравнения используются статистические характеристики, что обозначается «шляпками» в уравнении. В связи с тем, что наиболее частой является задача определения поверхностных источников атмосферных газов, то уравнение (2) решается для нижнего вертикального уровня модельной сетки, тогда как уравнение (1) численно интегрируется для всей модельной сетки [8]. Этот дифференциальный подход основывается на законе сохранения массы, поэтому он часто также называется балансовым методом решения обратной задачи. Решение уравнения (2) носит статистический характер, т.к. результаты наблюдений величин концентраций $c(r,t)$ статистически сглаживаются для замены расчетных значений $N(r,t)$.

Уравнение баланса газовой примеси в сферической системе координат в непрерывном виде выглядит как [7]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{1}{R_E \cos \varphi} \frac{\partial (uN)}{\partial \lambda} + \frac{1}{R_E \cos \varphi} \frac{\partial (vN \cos \varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial (wN)}{\partial z} = P_N - D_N N + \frac{1}{R_E^2 \cos^2 \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \times$$

$$\times \left[k_{xx} M \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{N}{M} \right) \right] + \frac{1}{R_E^2 \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[k_{yy} M \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{N}{M} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[k_{zz} M \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{N}{M} \right) \right].$$

Здесь u – зональная скорость ветра; v – меридиональная скорость ветра; w – вертикальная скорость ветра; R_E – радиус Земли; λ – долгота центра модельной ячейки; φ – широта центра модельной ячейки; P_N – скорость фотохимической продукции газа N ; $D_N N$ – скорость фотохимического разрушения N ; k_{xx} – коэффициент турбулентности в долготном направлении; k_{yy} – коэффициент турбулентности в широтном направлении; k_{zz} – коэффициент турбулентности в высотном направлении; M – концентрация воздуха.

Это уравнение используется для решения прямой задачи вычисления концентраций газовых загрязнителей во всех узлах модельной сетки. Его можно переписать в потоковой форме:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = P_N - D_N N - \frac{1}{R_E \cos \varphi} \frac{\partial (F_x)}{\partial \lambda} - \frac{1}{R_E \cos \varphi} \frac{\partial (F_y \cos \varphi)}{\partial \varphi} - \frac{\partial (F_z)}{\partial z},$$

где $F_x = uN - k_{xx} M \frac{1}{R_E \cos \varphi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{N}{M} \right); \quad F_y = vN - k_{yy} M \frac{1}{R_E} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{N}{M} \right);$

$$F_z = wN - k_{zz} M \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{N}{M} \right).$$

Потоки на границе бокса вокруг узла модельной сетки (рис. 1).

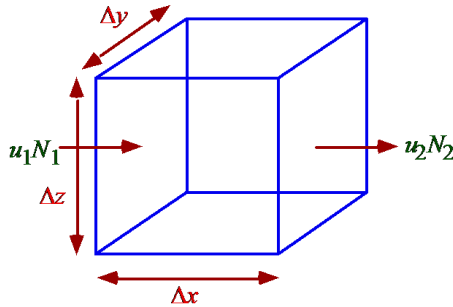


Рис. 1. Модельная ячейка с узлом модели в центре

На нижнем высотном уровне нижняя граница бокса находится на земной поверхности, поэтому поток здесь будет определяться разницей между наземным источником и стоком. Если рассмотреть баланс массы в отдельной ячейке, прилегающей к земной поверхности, то он будет определяться общим количеством газа в ячейке $N(t)\Delta x\Delta y\Delta z$ на начальный момент времени t , изменением содержания газа внутри ячейки за счет химических превращений $(P_N - D_N N)\Delta x\Delta y\Delta z\Delta t$ в течение шага времени Δt , разницей притока и оттока массы газа в широтном и меридиональном направлениях $(F_{x,1} - F_{x,2})\Delta y\Delta z\Delta t$ и $(F_{y,1} - F_{y,2})\Delta x\Delta z\Delta t$, потоком газа в верхнюю ячейку $-F_{z,2}\Delta x\Delta y$, а также балансом между потоком газа с земной поверхности и его разрушения на ней $[S_N - w_{d,N}N(t)]\Delta x\Delta y\Delta t$. В результате учета влияния этих процессов на нижнюю ячейку модельной сетки может быть решена прямая задача нахождения содержания газа в данной ячейке через временной интервал Δt :

$$N(t + \Delta t)\Delta x\Delta y\Delta z = N(t)\Delta x\Delta y\Delta z + [(F_{x,1} - F_{x,2})\Delta y\Delta z + (F_{y,1} - F_{y,2})\Delta x\Delta z + (S - w_{d,N}N(t) - F_{z,2})\Delta x\Delta y + (P_N - D_N N(t))\Delta x\Delta y\Delta z]\Delta t.$$

Если же известны концентрации исследуемого газа в моменты времени t и $t + \Delta t$, т.е. его эволюция, то из уравнения (3.3) можно решать обратную задачу определения потоков исследуемой примеси с поверхности в атмосферу. При этом, если нет дополнительной информации о скорости разрушения газа на поверхности, то будет вычисляться разница между потоком с поверхности и разрушением на ней:

$$S - w_{d,N}N(t) = \left[\frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} - \frac{(F_{x,1} - F_{x,2})}{\Delta x} - \frac{(F_{y,1} - F_{y,2})}{\Delta y} - (P_N - D_N N(t)) \right] \Delta z + F_{z,2}$$

Если же известны скорости разрушения исследуемого газа на земной поверхности, то можно вычислить чистый поток с поверхности

$$S = \left[\frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} - \frac{(F_{x,1} - F_{x,2})}{\Delta x} - \frac{(F_{y,1} - F_{y,2})}{\Delta y} - (P_N - D_N N(t)) \right] \Delta z + F_{z,2} + w_{d,N}N(t).$$

Конечно-разностное представление потоков в горизонтальном и вертикальном направлении предполагает задание концентраций исследуемого газа в соседних ячейках, что может достигаться или использованием результатов вычислений, или за счет решения прямой задачи.

Определение поверхностных концентраций исследуемых газов

$$N_{s,a}^j = N_{s,m}^j + \sum_{i=1}^N w_i (N_{s,o}^i - N_{s,m}^i),$$

где веса измерений определяются пропорционально погрешностям измерений и моделирования и расстоянию станции от узла модельной сетки

$$w_i^j = \frac{\rho_{ij} / E_{O,i}^2}{E_M^2 + \sum_{k=1}^N \rho_{kj} / E_{O,k}^2}.$$

Заключение

Разработана методология использования дистанционных измерений для анализа качества воздуха в зонах интенсивного загрязнения атмосферы путем решения обратной задачи по определению потоков загрязняющих веществ с поверхности по результатам измерений их общего содержания в атмосфере.

Литература

1. *Koffi, B., Szopa, S., Cozic, A., Hauglustaine, D., and van Velthoven, P.*: Present and future impact of aircraft, road traffic and shipping emissions on global tropospheric ozone, *Atmos. Chem. Phys.*, 2010, vol. 10, p. 11681-11705.
2. *Balzany Lööv, J.M., Alfoldy, B., Lagler, F. et al.* Why and how to measure remotely ship emissions // *Climate Change and Air Quality Unit Seminars.*, 2011, Ispra, Italy.
3. *Enting I.G.* Inverse Problems in Atmospheric Constituents transport // Cambridge University Press, Cambridge, 2002. – 21 pp.
4. *Brown M.* Deduction of emissions of source gases using an objective inversion algorithm and a chemical transport model // *J. Geophys. Res.*, 98D, 1993, 12 639-12660.
5. *Смышляев С.П., Ермакова Т.С., Мостаманди С.В., Курганский А.П.* Моделирование трансформации химически активных примесей атмосферы в региональном масштабе // *Уч. зап. РГГМУ*, 2013, № 29, с. 75-84.
6. *Smyshlyaev S.P., Geller M.A.* Analysis of SAGE II observations using data assimilation by SUNY-SPB two-dimensional model and comparison to TOMS data // *J. Geophys. Res.*, 2001, vol. 106, p. 32327-32335.
7. *Смышляев С.П., Кароль И.Л., Зубов В.А., Юдин В.А., Геллер М.А.* Двумерное моделирование сезонно-широтной изменчивости общего содержания атмосферного озона с использованием параметров крупномасштабного переноса из модели общей циркуляции атмосферы // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана*, 2002, т. 38, № 1, с. 81-94.
8. *Dvortsov V.L., Zvenigorodsky S.G., Smyshlyaev S.P.* On the use of Isaksen-Luther method of computing photodissociation rates in photochemical models // *J. Geophys. Res.*, 1992, vol. 97, no. D7, p. 7593-7601.

Работа выполнена в Российском государственном гидрометеорологическом университете в рамках выполнения госконтракта № 14.515.11.0103, а также в рамках гранта Правительства РФ (Договор № 11.G34.31.0078) для поддержки исследований под руководством ведущих ученых.