

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
Томский государственный университет

УДК

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по НР ТГУ, д.ф.-м.н.,
профессор

_____ Г.Е. Дунаевский
« ____ » _____ 2007 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

**«Модель атмосферной химии для исследования уровня загрязнения
воздуха в городе»**

Государственный контракт № 02.517.11.9011
в рамках ФЦНТП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-
технологического комплекса России на 2007-2012 годы

Научный руководитель,
д.ф.-м.н., профессор

_____ Старченко А.В.
подпись, дата

Томск 2007

Список основных исполнителей

Научный руководитель,
д.ф.-м.н., профессор

подпись, дата

Старченко А.В.
(раздел(ы) _____)

Исполнитель темы
к.ф.-м.н., доцент

подпись, дата

Беликов Д.А.
(раздел(ы) _____)

РЕФЕРАТ

Отчет 20 с., 3 ч., 5 рис., 1 табл., 18 источников.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА – ТУРБУЛЕНТНЫЙ ПОГРАНИЧНЫЙ СЛОЙ АТМОСФЕРЫ, ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ, ХИМИЧЕСКИЕ И ФОТОХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ.

Целью работы является разработка математической модели переноса примеси и построение эффективной параллельной реализации численного решения пространственных нестационарных адвективно-диффузионно-кинетических уравнений для исследования распространения и турбулентного рассеяния химически реагирующих загрязнителей в приземном слое атмосферы над урбанизированной территорией.

Для достижения данной цели сформулированы следующие основные задачи исследования:

1. Построить математическую модель переноса примеси с учетом химических и фотохимических взаимодействий между компонентами примеси, опирающуюся на явную анизотропную схему замыкания осреднённых по Рейнольдсу транспортных уравнений.
2. Разработать численные методы решения уравнений модели переноса примеси и модели атмосферного пограничного слоя и провести их апробацию.
3. Разработать эффективную параллельную реализацию вычислительного алгоритма.
4. Численно исследовать распространение примеси от точечных, линейных и площадных источников над территорией города и его окраинами.

Работы выполнены с использованием высокоропроизводительных систем кластерного типа Томского государственного университета (cyberia.tsu.ru) и Института оптики атмосферы СО РАН (cluster.iao.ru).

Практическая значимость работы определяется тем, что созданный алгоритм параллельного решения уравнения адвекции-диффузии позволяет с меньшими вычислительными затратами и более высоким пространственным разрешением получить детальную картину загрязнения приземного воздуха. Разработанная математическая модель и численный метод расчета используются в созданной в Томском государственном университете совместно с Институтом оптики атмосферы СО РАН компьютерной моделирующей системе исследования качества атмосферного воздуха над крупным индустриальным центром. При помощи созданной модели исследовано распределение примесей над городом Томском в различные сезоны. Благодаря быстродействию модель может быть использована в on-line системах контроля качества воздуха над индустриальными центрами.

План дальнейшего развития модели включает следующие пункты:

1. Адаптация комплексной современной модели химических и фотохимических взаимодействий, включающей более широкий спектр соединений и реакций. Что позволит повысить достоверность мониторинга и прогноза качества воздуха над городом и его окрестностями, а также исследовать образование и рассеяние большого количества соединений.
2. Развитие мезомасштабной метеорологической модели, учитывающей радиационный перенос тепла, фазовые превращения влаги, динамику турбулентной структуры в атмосферном пограничном слое над поверхностью с неоднородными свойствами. Усовершенствование метеорологической модели повысит качество предсказания динамики АПС, позволит с более высоким пространственным разрешением исследовать рассеяние примеси в региональном масштабе, даст возможность оценивать влияние других городов на качество воздуха в Томске.
3. Разработка разностных схемы повышенного порядка аппроксимации, эффективные алгоритмы численного решения транспортных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределённой памятью.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	8
1. Формулировка математической модели переноса примеси и образования вторичных загрязнителей в атмосферном пограничном слое	10
1.1. <i>Физическая постановка задачи</i>	10
1.2. <i>Прогностическая пространственная модель переноса примеси с учетом химических и фотохимических реакций</i>	10
1.3. <i>Кинетические схемы химических и фотохимических реакций</i>	11
1.4. <i>Начальные и граничные условия. Осаждение и эмиссия</i>	12
1.5. <i>Расчет метеорологических параметров и турбулентной структуры с использованием мезомасштабных метеорологических моделей</i>	13
2. Метод решения задачи	14
2.1. <i>Вид конечно-разностной аппроксимации</i>	14
2.2. <i>Параллельная реализация</i>	15
3. Результаты тестирования	17
Заключение	19

НОРМАТИВНЫЕ ССЫЛКИ

В настоящем отчете о НИР использованы ссылки на следующие стандарты:

- перечень стандартов, на которые в тексте отчета даны ссылки, с указанием номера и наименования стандарта; перечень приводится в порядке возрастания регистрационных номеров.

Определения

В настоящем отчете о НИР применяют следующие термины с соответствующими определениями:

- перечень определений, необходимых для уточнения или установления терминов, используемых в отчете о НИР.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

В настоящем отчете о НИР применяют следующие сокращения:

- АПС – атмосферный (планетарный) пограничный слой;
- СЛАУ – система линейных алгебраических уравнений;
- MM5 – Fifth-Generation Mesoscale Model;
- MPI – Message Passing Interface;
- RAMS – Regional Atmospheric Modeling System;
- TAPM – The Air Pollution Model;
- WRF – Weather Research and Forecast Model.

В настоящем отчете о НИР применяют следующие обозначения:

Обозначение	Размерность	Обозначаемый параметр
C_i	ppm	– средняя составляющая концентрации i -ой компоненты
c_i	ppm	– пульсационная составляющая концентрации i -ой компоненты
U, V	$м/с$	– осреднённые значения компонент скорости потока в направлении
u, v	$м/с$	– мгновенные значения компонент скорости потока в направлении
W_c	$м/с$	– осредненная вертикальная составляющая скорости при
w_c	$м/с$	– пульсационная вертикальная составляющая скорости при
S_i		– источниковый член, представляющий выбросы i -ой компоненты примеси
R_i		– химические реакции с i -ой компонентой примеси, происходящие в атмосфере
t	$с$	– время;
x, y, z	$м$	– координаты;
$\langle \rangle$		– знак осреднения по Рейнольдсу;
t	$с$	– временной масштаб турбулентных пульсаций;
C_{1q}, C_{2q}, C_{3q}	–	– эмпирические коэффициенты модели турбулентности;
g	$м/с^2$	– ускорение свободного падения;
Θ	$К$	– средняя составляющая потенциальной температуры;
θ	$К$	– пульсационная составляющая потенциальной температуры;
F	–	– функция, определяющая влияние поверхности на турбулентность;
r_i	ppm	– скорость протекания i -ой химической реакции;
k_i	$\frac{1}{с \cdot ppm}, \frac{1}{с}$	– коэффициент скорости протекания i -ой химической реакции;
Vd_i	$м/с$	– скорость сухого осаждения i -той компоненты примеси;
r_a	$с/м$	– аэродинамическое сопротивление турбулентной атмосферы элементам топографии поверхности;
r_b	$с/м$	– сопротивление ламинарного пограничного слоя элементам шероховатости поверхности;
r_c	$с/м$	– сопротивление, обусловленное растительностью;

u_*	m/c	– динамическая скорость, характерный масштаб скорости в приземном слое атмосферы;
z_0	m	– высота шероховатости;
L	m	– масштаб длины Обухова;
Sc_i		– число Шмидта для i -той компоненты примеси;
k	m^2/c^2	– кинетическая энергия турбулентности;
κ	–	– константа фон Кармана, $\kappa = 0,41$;
V_{ph}	m/c	– фазовая скорость;
C_0	ppm	– фоновая концентрация примеси;
n	–	– нормаль к поверхности;
L_x, L_y	m	– горизонтальные размеры расчетной области;
l	m	– интегральный масштаб турбулентности;
k	m^2/c^2	– кинетическая энергия турбулентности;
Φ	ppm	– дискретный аналог концентрации в разностном уравнении;
$P, E, W, N, S,$ T, B	–	– центры соседних конечных объемов.
p, e, w, n, s, t, b	–	– центры соответствующих граней конечного объемов.
$()_E, ()_W, ()_N,$ $()_S, ()_T, ()_B,$ $()_e, ()_w, ()_n,$ $()_s, ()_t, ()_b,$ $()_P$	–	– величины, относящиеся к соответствующим точкам конечных объемов.
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	m	– размеры конечного объема с центром в точке P ;
F, D		– адвективные и диффузионные потоки через соответствующие грани конечного объема
Δt	c	– шаг по времени;
N_x	–	– количество узлов горизонтальной сетки;
a, b	–	– прогоночные коэффициенты;
PM	–	– ширина расчетной области k -ого процессора;
A_x, B_x	–	– номера сечений при декомпозиции;
S_p	–	– ускорение параллельного алгоритма;
C_y^*	–	– безразмерная концентрация примеси;
x^*	–	– безразмерная горизонтальная координата;
z^*	–	– безразмерная вертикальная координата;
Q_i	$ppm \frac{m^2}{c}$	– мощность источника;
U_s	m/c	– скорость ветра на высоте источника;

ВВЕДЕНИЕ

Состояние атмосферы, особенно её нижней, соприкасающейся с земной поверхностью части – приземного слоя, имеет принципиальное значение для животного и растительного мира, а также человека. В настоящее время особую тревогу вызывает ухудшение качества воздуха, т.е. изменение его химического и аэрозольного состава вследствие антропогенного воздействия: выбросов в атмосферу отходов промышленных предприятий и выхлопных газов транспорта [1].

Эмиссии загрязняющих веществ в атмосферу избежать невозможно, однако разумное использование природных ресурсов и постоянный контроль качества атмосферного воздуха позволят обеспечить безопасный уровень воздействия на атмосферу и избежать экстремально негативных последствий.

Для мониторинга и прогноза экологического состояния атмосферы города наряду с инструментальными исследованиями успешно применяются методы математического моделирования. Область применения математических моделей прогнозирования и оценки качества воздуха на данный момент включает следующие основные задачи: выявление характерных особенностей распространения загрязнений над выбранной территорией при различных погодных условиях, изучение вклада отдельных источников в общий баланс загрязнения атмосферы, оценку последствий возможных аварийных ситуаций на предприятиях повышенной опасности, оценку воздействия проектируемых объектов [2, 3].

Сложность и взаимосвязанность процессов распространения, рассеяния и химической трансформации компонент примеси, происходящих в турбулентном атмосферном пограничном слое, делают модели прогнозирования качества воздуха громоздкими в математической записи и весьма требовательными к вычислительным ресурсам. Перспективным способом решения этих проблем является применение эффективных численных схем высокого порядка точности и использование компьютеров с параллельной архитектурой при проведении вычислений.

Математическому моделированию загрязнения атмосферного воздуха посвящены работы М.Е. Берлянда, Г.И. Марчука, В.В. Пененко, Р.Д. Борнштейна, Р.Д. Hurley, Н. Mayer, N. Moussioropoulos. Модели турбулентности атмосферного пограничного слоя и турбулентного переноса примеси разработаны в работах Г.С. Глушко, Б.Б. Илюшина, А.Н. Колмогорова, А.Ф. Курбацкого, А.С. Моница, А.М. Обухова, А. Andren, G.L. Mellor, T. Yamada. Подробные исследования химических и фотохимических реакций в атмосфере провели А. Е. Алоян, Г.И. Скубневская, W.P.L. Carter, J.H. Seinfeld, W.R. Stockwell. Параллельному программированию и методам распараллеливания численных алгоритмов посвящены работы В.В. Воеводина, Вл.В. Воеводина, В. И. Малышкина, В.А. Вшивкова, D. Dubdub и др.

В ближайшем будущем развитие моделей предсказания качества воздуха будет продиктовано более интенсивной антропогенной нагрузкой на атмосферу в городах и пойдёт по пути увеличения их пространственного разрешения и включения в рассмотрение большего числа процессов и атмосферных физико-химических явлений, что потребует разработки методов параллельных вычислений в задачах охраны окружающей среды.

Работа выполнялась в соответствии с основными направлениями НИР Томского государственного университета в рамках темы 1.02.04, 1.12.06 ЕЗН Министерства образования и науки РФ, а также по научным проектам, поддержанным грантами программы INCO COPERNICUS 2 Европейской комиссии (№ ICA2-CT-10024), РФФИ (№ 04-07-90219, № 05-05-98010р-Обь), Министерства образования (№ А03-2.10-686, № А04-2.10-770).

Научная новизна полученных результатов заключается в следующем:

1. Разработана схема замыкания уравнения переноса на основе явной анизотропной модели турбулентности, позволяющая существенно повысить качество предсказания рассеяния примеси в конвективных условиях АПС по сравнению с применяемыми в настоящее время моделями атмосферной диффузии.

2. Предложена новая эффективная модификация явно-неявного конечно-разностного метода решения пространственных нестационарных адвективно-диффузионно-кинетических уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределённой памятью, применение ко-

торой в значительной степени сокращает временные затраты на получение решения по сравнению с обычными последовательными алгоритмами.

3. Впервые с использованием методов математического моделирования систематически проведено исследование загрязнения атмосферы города Томска озоном и другими первичными и вторичными загрязнителями воздуха, выявлены особенности их пространственно-временного распределения в различное время суток и года.

1. ФОРМУЛИРОВКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ И ОБРАЗОВАНИЯ ВТОРИЧНЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В АТМОСФЕРНОМ ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ

3.1. Физическая постановка задачи

Распространение примеси в приземном слое атмосферы над промышленным центром и его окрестностями исследуется при следующих условиях и допущениях. Рассматривается перенос и рассеяние химически реагирующей многокомпонентной смеси, состоящей из газофазных примесей, которые поступают от совокупности точечных, линейных и площадных источников, а также аэрозолей, образующихся в атмосфере в результате химических реакций. Небосвод считается безоблачным и оптически прозрачным, при этом уровень падающей солнечной радиации определяется зенитным углом Солнца и содержанием водяного пара в атмосфере, что обеспечивает моделирование суточного изменения скоростей фотохимических реакций, а следовательно, и суточную динамику концентраций соответствующих компонент примеси.

Ослабление солнечного излучения при прохождении луча света через атмосферу обусловлено в значительной степени присутствием в атмосферном воздухе водяных паров, поэтому влияние озона, углекислого газа и других соединений, поглощающих коротковолновое солнечное излучение, не учитывается. Другими видами взаимодействия атмосферы и радиационного излучения (например, радиационным нагревом атмосферы) пренебрегаем. Существенное влияние на распределение концентрации загрязняющих веществ в нижней части пограничного слоя оказывает сухое осаждение примеси, обусловленное типом подстилающей поверхности.

При условии безоблачного неба вполне допустимо пренебречь фазовыми превращениями воды в атмосфере, поскольку их влияние становится существенным при активном формировании облачности и, особенно, во время выпадения осадков.

3.2. Прогностическая пространственная модель переноса примеси с учетом химических и фотохимических реакций

Расчет концентрации примеси в рамках эйлерова континуального подхода осуществляется по модели турбулентной диффузии, которая включает транспортное уравнение [1-5]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial UC}{\partial x} + \frac{\partial VC}{\partial y} + \frac{\partial W_c C}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial x} \langle cu \rangle - \frac{\partial}{\partial y} \langle cv \rangle - \frac{\partial}{\partial z} \langle cw_c \rangle + S + R; \quad (1)$$

описывающее адвекцию, турбулентную диффузию, источники примеси и химические реакции [1]. Здесь $C(t, x, y, z)$, $c(t, x, y, z)$ – осредненная и пульсационная составляющие концентрация примеси; (U, V) , (u, v) – осредненные и пульсационные горизонтальные компоненты вектора ветра, W_c , w_c – осредненная и пульсационная вертикальные составляющая скорости примеси; S – источниковый член, представляющий выбросы примеси в атмосферу, R – химические реакции с компонентами примеси, протекающие в воздухе, t – время, (x, y, z) – координаты.

Уравнение (1) незамкнуто, т.к. в нем кроме искомой концентрации C присутствуют дополнительные неизвестные – корреляции $\langle cu \rangle$, $\langle cv \rangle$, $\langle cw_c \rangle$, представляющие турбулентную диффузию примеси и выражающиеся через моменты более высокого порядка, определение которых представляется крайне сложной задачей [6]. В настоящее время достигнуто общее понимание этой проблемы, разработаны подходы и методы (например, подход основанный на градиентных соотношениях Буссинеска [1, 6]), использование которых во многих простых случаях дает приемлемые результаты [7]. Однако, для расчета более сложных процессов, в том числе атмосферных, требуются модели, опирающиеся на уравнения для моментов более высокого порядка. В данной работе

используется оригинальный метод замыкания уравнения переноса примеси [8], согласно которому неизвестные турбулентные потоки массы вычисляются следующим образом:

$$-\langle cu \rangle = \frac{\tau}{C_{10}} \left((1 - C_{20}) \langle cw_c \rangle \frac{\partial U}{\partial z} + \langle u_i u \rangle \frac{\partial C}{\partial x_i} \right); \quad (2)$$

$$-\langle cv \rangle = \frac{\tau}{C_{10}} \left((1 - C_{20}) \langle cw_c \rangle \frac{\partial V}{\partial z} + \langle u_i v \rangle \frac{\partial C}{\partial x_i} \right); \quad (3)$$

$$-\langle cw_c \rangle = \frac{\tau}{C_{10} + D_{1C} F} \left(-(1 - C_{30}) \frac{g}{\Theta} \langle c\theta \rangle + \langle u_i w_c \rangle \frac{\partial C}{\partial x_i} \right). \quad (4)$$

В соотношениях (2)-(4) по повторяющемуся индексу i подразумевается суммирование. Для нахождения неизвестной корреляции пульсаций температуры и концентрации $\langle c\theta \rangle$, входящей в (4), выводится дифференциальное уравнение [8]. Турбулентные потоки тепла и импульса, входящие в выражения (2)-(4), определяются при помощи алгебраических соотношений, представленных в [9].

Полученные соотношения по внешнему виду напоминают градиентные замыкающие соотношения Буссинеска.

3.3. Кинетические схемы химических и фотохимических реакций

Для достоверного прогноза качества воздуха требуется учитывать в модели переноса примеси химические реакции образования вторичных загрязнителей. В обзоре [8] представлен широкий спектр кинетических схем, способных на высоком уровне обеспечить воспроизведение процессов генерации и трансформации веществ в атмосфере. Однако, кроме количества рассматриваемых химических реакций и числа реагирующих компонент примеси, которые, в первую очередь, определяют полноту представления в модели реально протекающих химических взаимодействий, существенными факторами, влияющими на выбор того или иного механизма, являются возможность явного представления в нем отдельных соединений и низкие вычислительные затраты при решении.

Схемы с большим набором рассматриваемых химических веществ при более детальном моделировании атмосферной химии уступают в быстродействии упрощенным механизмам, которые при сокращенном представлении процессов трансформации и генерации все же позволяют с приемлемой точностью рассчитывать подробные распределения концентраций отдельных соединений. Заметим, что точность задания исходных данных существенным образом влияет на качество расчетов по полной химической модели.

В данной работе для оценки и прогнозирования загрязнения атмосферы тропосферным озоном и другими вторичными загрязнителями используются один из адаптированных к условиям города Томска сокращенных механизмов [4] – полуэмпирический механизм GRS (Generic

Таблица 1. Реакции фотохимической схемы GRS ($n_s=11$, $M=8$)

Реакции	Скорости реакций	Коэффициенты скоростей реакций
$R_{\text{smog}} + h\nu \rightarrow RP + R_{\text{smog}} + \eta \text{SNGOC}$	$r_1 = k_1 C_{R_{\text{smog}}}$	$k_1 = k_3 e^{(-4700(1/T - 1/316))}$
$RP + NO \rightarrow NO_2$	$r_2 = k_2 C_{RP} C_{NO}$	$k_2 = 3580/60T$
$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O_3$	$r_3 = k_3 C_{NO_2}$	$k_3 = 0.00018 \times \text{TSR}/60$
$NO + O_3 \rightarrow NO_2$	$r_4 = k_4 C_{NO} C_{O_3}$	$k_4 = (924/60T) e^{-1450/T}$
$RP + RP \rightarrow RP + a H_2O_2$	$r_5 = k_5 C_{RP} C_{RP}$	$k_5 = 1000/60$
$RP + NO_2 \rightarrow \text{SGN}$	$r_6 = k_6 C_{RP} C_{NO_2}$	$k_6 = 0.12/60$
$RP + NO_2 \rightarrow \text{SNGN}$	$r_7 = k_7 C_{RP} C_{NO_2}$	$k_7 = k_6$
$RP + SO_2 \rightarrow \text{SNGS}$	$r_8 = k_8 C_{RP} C_{SO_2}$	$k_8 = 0.1k_6$

Reaction Set) [5]. Механизм рассматривает 11 химических компонентов (реагирующая часть смога R_{smog} , органические радикалы RP , перекись водорода H_2O_2 , оксид азота NO , диоксид азота NO_2 , озон O_3 , диоксид серы SO_2 , устойчивые негазообразные органические соединения углерода $SNGOC$, устойчивые газообразные соединения азота SGN , устойчивые негазообразные соединения азота $SNGN$, устойчивые негазообразные соединения серы $SNGS$), участвующих в 8 химических реакциях (Таблица 1). Реакции № 1, 3 являются фотохимическими, поэтому коэффициенты скоростей реакций зависят от δ – функции зенитного угла солнца и TSR – максимального уровня солнечной радиации, определяемого географической широтой области исследования.

Данная схема, дополненная водofазными реакциями для диоксида серы и аэрозолей, включена в трехмерную негидростатическую модель TAPM (The Air Pollution Model) [5], представляющую собой программный комплекс, нацеленный на изучение мезомасштабной метеорологии, а также переноса и трансформации загрязнителей.

Уравнения изменения концентрации компонент примеси для схемы GRS имеют вид:

$$\begin{aligned} R_{[APM]} &= F_{CH_2} h r_1 + F_{HNO_3} r_7 + F_{H_2SO_4} r_8; & R_{[SP_x]} &= r_2 - r_6 - r_7; \\ R_{[RP]} &= r_1 - r_2 - r_5 - r_6 - r_7 - r_8; & R_{[H_2O_2]} &= s r_5; \\ R_{[SO_2]} &= -r_8; & R_{[NO_x]} &= -r_6 - r_7; \\ R_{[NO_2]} &= r_2 + r_4 - r_3 - r_6 - r_7; & R_{[R_{\text{smog}}]} &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь APM – класс аэрозолей, объединяющий собой устойчивые негазообразные органические соединения углерода $SNGOC$, устойчивые негазообразные соединения азота $SNGN$, устойчивые негазообразные соединения серы $SNGS$, $F_{CH_2} = 0,57$, $F_{H_2SO_4} = 4,0$, $F_{HNO_3} = 2,6$ – приближенные коэффициенты, определяющие переход устойчивых негазообразных соединений в аэрозоли; $C_{NO_x} = C_{NO} + C_{NO_2}$, $C_{SP_x} = C_{O_3} + C_{NO_2}$ введены для увеличения эффективности расчетной схемы,

$$h = 0,1, \quad s = \max \left(0,03, \exp \left(-0,0261 \frac{[R_{\text{smog}}]}{[NO_x]} \right) \right) - \text{численные коэффициенты [5].}$$

В данной схеме концентрации всех компонент вычисляются в ppm , кроме концентрации APM , измеряемой в $мкг/м^3$.

3.4. Начальные и граничные условия. Осаждение и эмиссия

На нижней границе ставятся граничные условия, представляющие сухое осаждение компонентов примеси в виде простой модели сопротивления [10, 11]:

$$-\langle c_i w \rangle = Vd_i C_i, \quad i = 1, \dots, n_s; \quad (6)$$

$$Vd_i = \frac{1}{r_a + r_b + r_c}; \quad r_a = \frac{\Psi(z/z_0, z/L)}{k v_*}; \quad r_b = \frac{2(Sc_i/0,72)^{\frac{2}{3}}}{k v_*}; \quad r_c = 60,0 c/m \quad (7)$$

$$\Psi(z/z_0, z/L) = \begin{cases} \ln(z/z_0) - 2 \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 9z/L}}{1 + \sqrt{1 - 9z_0/L}} \right), & z/L \leq 0; \\ \ln(z/z_0) + 6,34 \left(\frac{z}{L} - \frac{z_0}{L} \right), & z/L > 0. \end{cases} \quad (8)$$

Здесь Vd_i – скорость сухого осаждения i -той компоненты примеси, r_a – аэродинамическое сопротивление турбулентной атмосферы элементам топографии поверхности, r_b – сопротивление ламинарного подслоя элементам шероховатости поверхности, r_c – сопротивление, обусловленное

растительностью, z – высота, z_0 – высота шероховатости, L – масштаб Обухова, Sc_i – число Шмидта для i -той компоненты примеси, $k = 0.41$ – постоянная фон Кармана, v_* – динамическая скорость.

На верхней границе для концентраций C_i и корреляций $\langle cq \rangle$ ставятся простые градиентные условия.

На боковых границах расчетной области используются условия радиационного типа, способствующие выходу возмущений, сгенерировавшихся в области (погрешность метода и округления), за её пределы без отражения. Они формулируются следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_{ph} \frac{\partial C}{\partial n} = \frac{\partial C_0}{\partial t} + V_{ph} \frac{\partial C_0}{\partial n}, \quad (9)$$

где C – концентрация, C_0 – фоновая концентрация примеси, n – нормаль к поверхности, V_{ph} – фазовая скорость.

Тогда для каждого горизонтального уровня будем иметь:

$$\begin{aligned} x=0: \quad \frac{\partial C}{\partial t} - V_{ph}^E \frac{\partial C}{\partial x} &= \frac{\partial C_0}{\partial t} - V_{ph}^E \frac{\partial C_0}{\partial x}; & x=L_x: \quad \frac{\partial C}{\partial t} + V_{ph}^W \frac{\partial C}{\partial x} &= \frac{\partial C_0}{\partial t} + V_{ph}^W \frac{\partial C_0}{\partial x}; \\ y=0: \quad \frac{\partial C}{\partial t} - V_{ph}^B \frac{\partial C}{\partial y} &= \frac{\partial C_0}{\partial t} - V_{ph}^B \frac{\partial C_0}{\partial y}; & y=L_y: \quad \frac{\partial C}{\partial t} + V_{ph}^T \frac{\partial C}{\partial y} &= \frac{\partial C_0}{\partial t} + V_{ph}^T \frac{\partial C_0}{\partial y}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $V_{ph}^E \geq 0$, $V_{ph}^W \geq 0$, $V_{ph}^B \geq 0$, $V_{ph}^T \geq 0$ – фазовые скорости на соответствующих границах.

Фоновые значения концентраций C_0 определяются на каждом шаге предварительным расчетом при помощи боксовой модели, в которой моделируются только лишь химические реакции без учета переноса и турбулентной диффузии. Начальные фоновые значения выбираются по данным измерений. При инициализации модели считается, что во всей расчетной области концентрации рассматриваемых компонентов примеси равны начальным фоновым.

3.5. Расчет метеорологических параметров и турбулентной структуры с использованием мезомасштабных метеорологических моделей

Для проведения расчетов по модели переноса примеси необходимы метеорологические данные: поля скорости ветра, температуры, влажности. Их получение возможно на основе различных подходов – от привлечения простых моделей интерполяционного типа, ориентированных на распространение локально измеренных данных на всю область исследования, до современных мезомасштабных прогностических моделей. В качестве входных данных в предложенной модели переноса могут быть использованы метеорологические поля расчета по моделям **MM5** и **WRF**, адаптированным к условиям Томского региона [12], моделирующей системы **ТГУ-ИОА** [13] или нестационарной модели однородного АПС [14]. При этом используется трехпараметрическая « $k-l-\langle q^2 \rangle$ » модель турбулентности, включающая прогностические уравнения для энергии и масштаба турбулентности, а также квадрата пульсации температуры [8].

4. МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

4.1. Вид конечно-разностной аппроксимации

Задача моделирования распространения примеси вместе с граничными и начальными условиями решается численно конечно-разностным методом. Аппроксимация дифференциальных операторов в (1) осуществлена со вторым порядком точности по координатам и первым – по времени с использованием явных разностных схем для всех членов уравнения за исключением вертикальной диффузии. Такой способ дискретизации дифференциальной задачи позволяет решить проблемы, возникающие из-за нелинейности уравнений (1), и существенно ускорить получение результата вследствие применения экономичного метода прогонки при приемлемом ограничении на величину шага по времени [15]. Адвективные члены уравнений переноса (1) аппроксимируются с использованием монотонизированной противопотоковой схемы Ван-Лира [16].

Дискретный аналог уравнения переноса (1) при фиксированном индексе $1 \leq i \leq n_s$, $S = S_i$, $R = R_i$, $\Phi = C_i$ можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \left[a_p^0 - (S_p^{1k} + R_p^{1k}) \Delta x \Delta y \Delta z_p + D_t + D_b \right] \Phi_p^{k+1} = D_t \Phi_T^{k+1} + D_b \Phi_B^{k+1} + \\ + \left[a_E \Phi_E^k + a_W \Phi_W^k + a_N \Phi_N^k + a_S \Phi_S^k + a_T \Phi_T^k + a_B \Phi_B^k - a_p \Phi_p^k \right] + b, \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$a_E = \max(-F_e; 0) + D_e; \quad a_W = \max(F_w; 0) + D_w; \quad a_N = \max(-F_n; 0) + D_n;$$

$$a_S = \max(F_s; 0) + D_s; \quad a_T = \max(-F_t; 0); \quad a_B = \max(F_b; 0);$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B - a_p^0;$$

$$b = (S_p^{0k} + R_p^{0k}) \Delta x \Delta y \Delta z_p + Dm_p^*; \quad a_p^0 = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z_p}{\Delta t}.$$

Здесь $\Phi_p^{k+1} = \Phi(t + \Delta t, x_i, y_j, z_n)$, k – номер слоя по времени, $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – размеры конечного объема с центром в точке P (рис. 1); центры соседних конечных объемов – по направлениям сторон света N, S, E, W , а также расположенные выше T и ниже B соответственно, а центры соответствующих граней конечного объема – n, s, e, w, t, b, F, D – адвективные и диффузионные потоки через соответствующие грани конечного объема; при аппроксимации источников членов использовалась «линеаризованная» форма записи: $S_p^{k+1} \cong S_p^{0k} + S_p^{1k} \Phi_p^{k+1}$, $R_p^{k+1} \cong R_p^{0k} + R_p^{1k} \Phi_p^{k+1}$, $R_p^{1k}, S_p^{1k} \leq 0$; Dm_p^* содержит смешанные производные на временном слое k и наклон в MLU-представлении потоков.

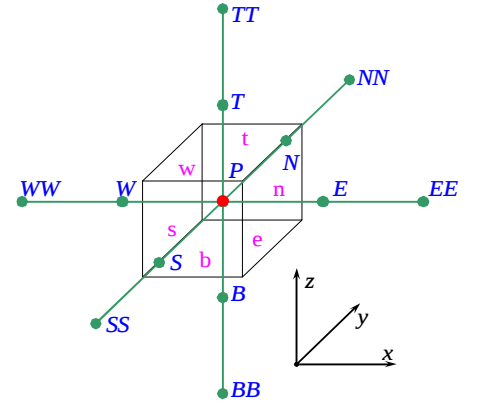


Рис. 1. Вычислительная ячейка

При дискретизации уравнений (1) используется явно-неявная разностная схема, которая позволяет решить проблемы, возникающие вследствие нелинейности уравнений (1), и существенно ускорить получение результата благодаря применению экономичного метода прогонки при приемлемом ограничении на величину шага по времени.

Предложенная разностная схема (11) является устойчивой, если величина шага по времени удовлетворяет условию:

$$\Delta t \leq \frac{2 \Delta x \Delta y \Delta z_p A_1}{(2A_1)^2 + (B_1)^2}. \quad (12)$$

Здесь: $A_1 = a_E + a_W + a_S + a_N + a_T + a_B$; $B_1 = (a_E - a_W) + (a_N - a_S) + (a_T - a_B)$.

4.2. Параллельная реализация

В работе применена одномерная декомпозиция сеточной области по горизонтальной координате, согласно которой каждому вычислительному процессору предоставляется участок подстилающей поверхности и столб атмосферы над ним. На этапе инициализации каждый процесс получает информацию о физических параметрах своей подобласти (метеорологические данные, параметры подстилающей поверхности, данные об источниках и т.д.) и подготавливается к вычислениям.

При расчете приграничных значений в силу используемого разностного шаблона процессы нуждаются в данных, которые находятся в локальной памяти соседних процессов (рис. 2), поэтому в течение всего времени расчета соседние процессы активно обмениваются между собой данными из приграничных ячеек.

На рис. 3 представлена декомпозиция сеточной области в случае использования двух процессоров (нулевого и первого). Вдоль горизонтального направления OX , по которому производится декомпозиция, выполняется перенумерация узлов сетки следующим образом. Нулевой вычислительный процесс ведет расчеты в подобласти с горизонтальной нумерацией узлов с первого до узла с номером $N_x/2$ (под делением подразумевается целочисленная операция).

Вычислительная область нулевого процесса ограничивается справа двумя сечениями, в которые заносятся данные, рассчитываемые правым соседом (первым процессом). Таким образом, область, с которой работает нулевой процессор, состоит из $N_x/2 + 3$ сечений с нумерацией от $A_x^0 = 0$ до $B_x^0 = N_x/2 + 2$. Аналогичным образом, расчетная область первого процессора, состоит из $N_x/2 + 3$ сечений с нумерацией от $A_x^1 = N_x/2 - 1$ до $B_x^1 = N_x + 1$. При обмене данными, получаемые от нулевого процесса, заносятся в A_x^1 , $A_x^1 + 1$ сечения первого процессора. В общем случае, при декомпозиции на p процессоров ширина расчетной области для любого k -ого процесса имеет вид:

$$PM = \frac{N_x}{p}. \quad (13)$$

Здесь также подразумевается целочисленное деление. В случае если N_x не делится нацело на число процессоров p , оставшиеся от деления полосы в количестве $N_x - p \cdot PM$ равномерно распределяются по процессам, т.е. часть процессов имеет ширину расчетной области $PM = N_x/p$, а оставшиеся – $PM = N_x/p + 1$. При этом, естественно, выполняется условие: $N_x = \sum_{m=0}^{p-1} PM_m$.

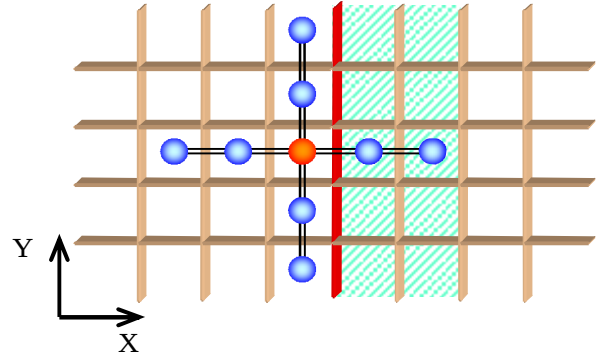


Рис. 2. Расчет приграничных значений с использованием 9-точечного шаблона (9 точек шаблона располагаются в горизонтальной плоскости)

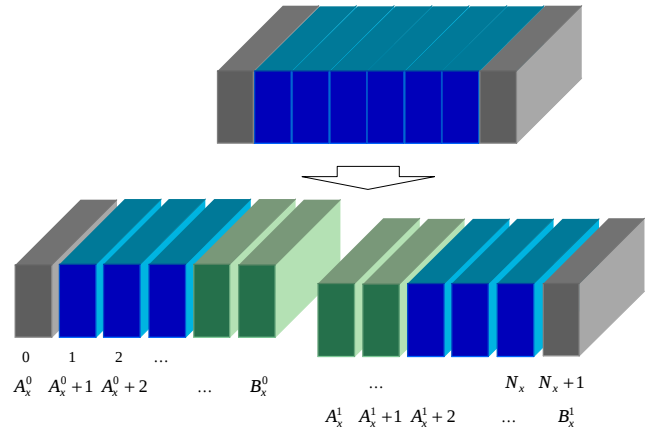


Рис. 3. Схема одномерной декомпозиции параллельной реализации явно- неявного метода на примере двух процессоров

Вычислительная область m -ого процесса ($0 < m < p-1$) окаймляется справа двумя сечениями, в которые заносятся данные, рассчитываемые правым соседом ($m+1$ -ым процессом), и двумя сечениями слева, в которые заносятся данные, рассчитываемые левым соседом ($m-1$ -ым процессом).

Алгоритм параллельной реализации явно-неявного метода состоит из следующих шагов:

1. Декомпозиция расчетной области на p процессов; каждый процесс получает информацию о своем номере и об общем количестве процессов; определяет своих соседей слева и справа, ширину своей подобласти по формуле (13).

2. Получение процессорами начального приближения для своей подобласти $\Phi_{l,j,n}^k$.

3. Расчет коэффициентов сеточных уравнений (11) по явным формулам.

4. Прямой ход прогонки. Расчет значений прогоночных коэффициентов в каждом вертикальном столбце α_n и β_n , $n = 2, N_z - 1$ для каждой подобласти.

5. Обратный ход прогонки. Расчет значения функции $\Phi_{l,j,n}^{k+1}$ в области по формуле $\Phi_{l,j,n}^{k+1} = a_n \Phi_{l,j,n+1}^{k+1} + b_n$; $n = N_z - 1, \dots, 1$; $k = 0, 1, 2, \dots$

6. Посылка значений сечений $A_x^m + 2$, $A_x^m + 3$ левому соседу и $B_x^m - 3$, $B_x^m - 2$ правому соответственно; прием от левого соседа сеточных значений сечений A_x^m , $A_x^m + 1$ и B_x^{m-1} , $B_x^{m-1} - 1$ от правого соседа. В случае отсутствия соответствующего соседа операция пересылки не производится.

7. Если движение по временной оси не прекращено – возврат к п. 3.

8. Если движение по временной оси прекращено, то производится сборка всех сеточных значений $\{\Phi_{l,j,n}^{k+1}\}$ на одном процессе (например, нулевом).

В работе теоретически и практически исследовано ускорение параллельной версии программы. Результаты представлены на рис. 4. Для получения практической оценки ускорения параллельного алгоритма по отношению к последовательному был проведен ряд расчетов на кластере ИОА СО РАН для периода моделирования 1 час на сетке $100 \times 100 \times 100$ узлов с использованием схемы GRS при описании химических и фотохимических взаимодействий.

Получено хорошее согласование расчетных данных (символы) и результатов теоретической оценки (кривая).

Теоретическая оценка получена по формуле:

$$S_p = p / \left(1 + \frac{(p-1)pk}{(2 + x/4)N_x} \right). \quad (14)$$

Здесь S_p – ускорение, p – число используемых процессоров, k – отношение времени передачи данных между процессами ко времени выполнения арифметической операции, x – число арифметических операций для расчета коэффициентов расчетной схемы (11),

Ускорение, достигающее значения 14 при использовании 20-ти процессоров, свидетельствует о хорошей степени параллелизма алгоритма и удачном планировании обменов между процессами.

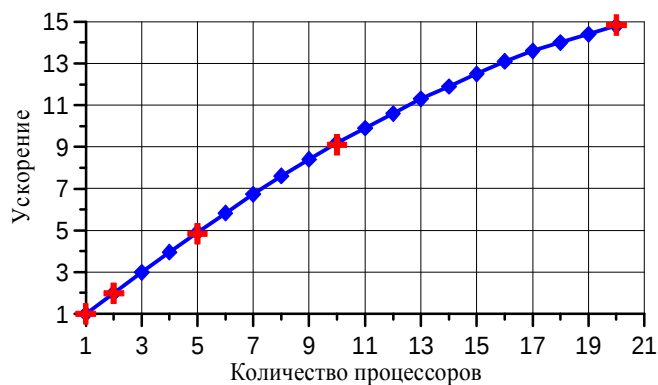


Рис. 4. Ускорение параллельной реализации программы. Линия – результаты теоретической оценки, символы – практические расчеты

5. РЕЗУЛЬТАТЫ

5.1. Тестирование

Тестирование модели осуществлялось на задаче переноса и рассеяния примеси в конвективном пограничном слое от приподнятого над поверхностью источника непрерывного действия.

В развитом конвективном АПС примесь, выпущенная из приземного непрерывно действующего источника, перемещается параллельно поверхности, постепенно поднимаясь в перемешанном слое атмосферы. А из приподнятого над поверхностью источника переносится вниз, к подстилающей поверхности. Эта поразительная особенность диффузии примеси от приподнятого источника отражает существование преобладающего процесса снижения струи примеси над процессом вовлечения вещества примеси в более мелкие, быстро перемещающиеся образования. Такое поведение обусловлено асимметрией функции плотности вероятности вертикальной скорости турбулентных пульсаций $\langle w^2 \rangle$, имеющей четко выраженную отрицательную моду [17].

Результаты моделирования распространения примеси от приподнятого источника высотой $z_s = 0,24z_i$ в сравнении с данными натурного эксперимента [18] показаны на рис. 5. Результаты расчетов по модели хорошо согласуются с результатами эксперимента. Шлейф от приподнятого источника на первом этапе опускается и пересекает поверхность Земли между $0,5x^*$ и $1,0x^*$, а затем начинает подниматься.

Условия проведения расчетов и данные для сравнения взяты из [17]. Здесь $C_y^* = C_y(x, z) z_i U_s / Q_i$ – безразмерная концентрация примеси; ось x^* эквивалентна безразмерному расстоянию в направлении вниз по потоку от источника $x^* = x w_* / U_s z_i$; $z^* = z / z_i$ – безразмерная вертикальная координата; w_* – конвективный масштаб скорости; U_s – скорость ветра на высоте источника; $C_y(x, z)$ – концентрация примеси, осредненная по горизонтальной координате Oy , перпендикулярной направлению вектора скорости ветра; Q_i – мощность источника.

Результаты тестирования предложенной численной модели, опирающейся на оригинальную схему замыкания уравнения переноса и алгебраические соотношения для турбулентных потоков количества движения, тепла и массы, показали хорошее согласование с результатами натурных наблюдений при рассмотрении распространения примеси от непрерывно действующего источника в конвективном АПС (рис. 5).

Предложенные соотношения для замыкания транспортного уравнения, дополненные алгебраическими соотношениями, используются в модели переноса примеси [4, 8] и могут быть применены к целому классу подобных задач переноса.

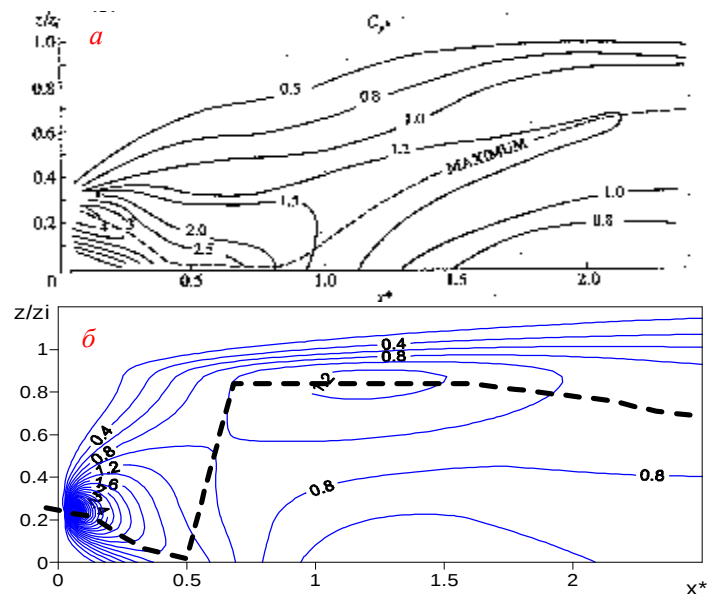


Рис. 5. Изолинии безразмерной концентрации примеси C_y^* в плоскости $Ox^* z^*$. Высота источника $z_s = 0,24z_i$. Рисунок (а) взят из работы [Ошибка! Источник ссылки не найден.], (б) – результат моделирования с использованием алгебраических соотношений

5.2. Результаты применения

На рис. 6 приведено сравнение результатов расчетов, выполненных с использованием предложенной модели переноса примеси, с расчетными данными модели прогноза качества воздуха CAMx и результатами измерений TOR-станции ИОА СО РАН для условий 26–27 мая 2004 года.

Расчетные профили показывают, что приземная концентрация озона начинает расти после восхода солнца и достигает своего максимума после полудня, когда солнечная активность начинает убывать (рис. 6, а). Это обусловлено тем, что в дневное время значительной становится фотохимическая реакция фотолиза диоксида азота с образованием озона и оксида азота, скорость которой превосходит скорость обратной реакции. Такая ситуация приводит к снижению концентрации диоксида азота в дневное время, поскольку уровень его эмиссии невысок и неспособен компенсировать потери.

В ночное время фотохимические реакции отсутствуют, поэтому существенное значение приобретает реакция взаимодействия оксида азота с озоном с образованием диоксида азота, что обеспечивает накопление последнего в приземном слое атмосферы.

Таким образом, профили приземной концентрации озона коррелируют с профилями уровня солнечной радиации (рис. 6, а, г) с максимальными значениями около полудня. В то время как для концентрации диоксида азота, наоборот, характерны дневные минимумы и ночные максимумы (рис. 6, б).

Характерные ночные максимумы и дневные минимумы концентрации оксида углерода (рис. 6, в), по всей видимости, обусловлены фактором запирающей инверсии. Радиационное выхолаживание поверхности в ночные часы снижает турбулентное перемешивание в приземном слое и, соответственно, вынос примеси в верхние слои атмосферного пограничного слоя, что способствует её накоплению вблизи поверхности. Утреннее разрушение инверсии за счет солнечной радиации и прогрева земной поверхности, наоборот, интенсифицирует обменные процессы между нижними и верхними слоями, следовательно, способствует рассеянию примеси.

Таким образом, имеет место хорошее соответствие предсказанных и измеренных значений приземных концентраций примеси и метеорологических параметров.

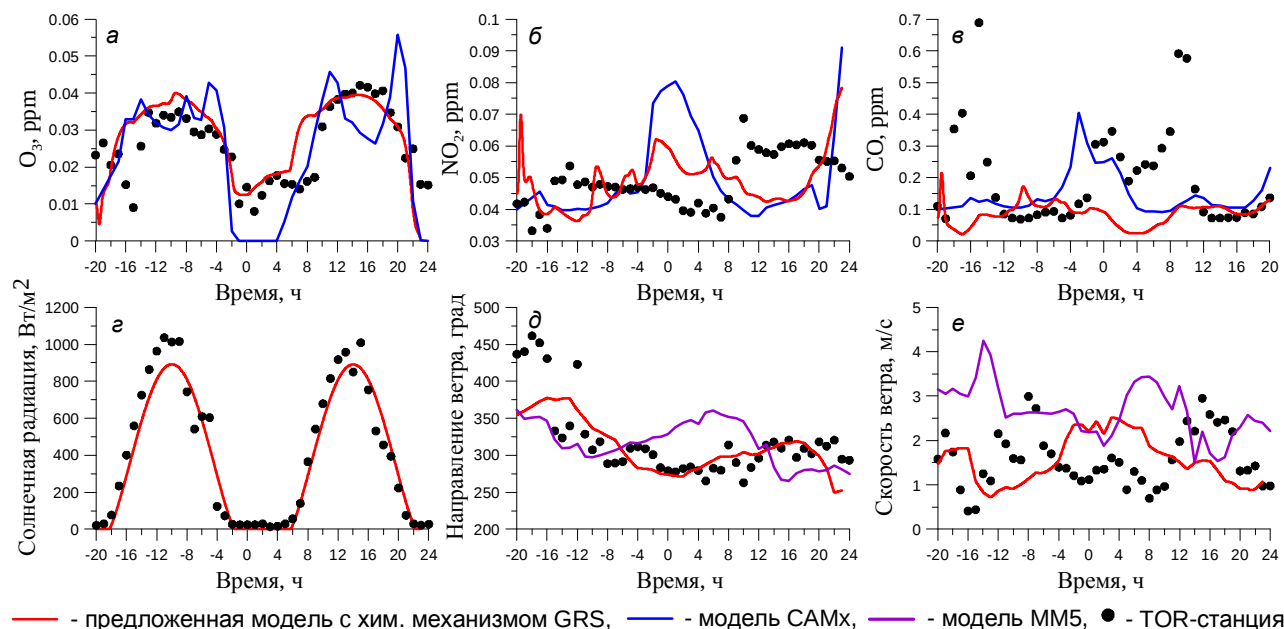


Рис. 6. Сравнения результатов расчетов по моделям с данными наблюдений по концентрациям озона (а), диоксида азота (б), оксида углерода (в), суммарной солнечной радиации (г), направлению (д) и скорости ветра (е) для условий 26–27 мая 2004 года. Отрицательная часть временной оси соответствует первым суткам моделирования, положительная – вторым

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработана пространственная модель переноса примеси с учетом образования вторичных загрязнителей. Для замыкания уравнений переноса примеси предложена явная анизотропная схема, в которой на основе околоравновесного приближения турбулентные потоки массы представляются в виде простых замыкающих соотношений градиентного типа. Выведены и включены в модель алгебраические соотношения для турбулентных напряжений и потоков, которые существенно расширяют возможности используемой модели турбулентности. Для оценки и прогнозирования загрязнения атмосферы тропосферным озоном и другими вторичными загрязнителями адаптированы три упрощенные схемы химических реакций. Необходимые метеорологические параметры рассчитываются с использованием нестационарной модели для однородного АПС либо на основе современной мезомасштабной метеорологической модели (MM5, WRF, моделирующей системы ТГУ–ИОА).

2. Для численного решения задачи применен метод конечного объема и получена разностная явно-неявная схема со вторым порядком аппроксимации дифференциальных уравнений по пространственным координатам. Разработана эффективная вычислительная процедура для решения уравнений переноса с учетом химических превращений компонент примеси, позволяющая получать решения уравнений без привлечения специальных методов для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

3. Разработана эффективная параллельная реализация явно-неявного конечно-разностного метода решения адвективно-диффузионных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределённой памятью. Создана параллельная программа, использующая одномерную декомпозицию сеточной области по одной из горизонтальных координат. Теоретический анализ ускорения разработанной вычислительной процедуры и результаты применения параллельной программы на кластере ИОА СО РАН показали высокую эффективность организации параллельных вычислений, обеспечивающую 14-кратное ускорение получения результатов на 20-ти процессорах по сравнению с однопроцессорным вариантом.

4. Проведено тестирование предложенной численной модели для исследования загрязнения атмосферы города с учетом образования примесей вторичной эмиссии, опирающейся на оригинальную схему замыкания уравнения переноса и алгебраические соотношения для турбулентных потоков количества движения, тепла и массы.

5. Полученные результаты по моделированию хорошо согласуются с результатами фундаментальных экспериментов (турбулентное рассеяние примеси от непрерывно действующего точечного источника), а также с результатами расчетов по пространственной нестационарной модели качества воздуха CAMx версии 4.20 для условий города Томска. Кроме того, достигнуто хорошее согласование расчётных профилей метеорологических параметров, полученных по модели АПС в предположении однородной атмосферы, с результатами расчетов по мезомасштабной модели MM5 и данными метеорологических наблюдений за погодой в г. Томске.

Список использованных источников

1. **Берлянд, М.Е.** Прогноз и регулирование загрязнений атмосферы [Текст] / М.Е. Берлянд – Л.: Гидрометеиздат, 1985. – 168 с.
2. **Марчук, Г.И.** Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г.И. Марчук – М.: Наука. – 1982. – 320 с.
3. **Пененко, В.В.** Методы численного моделирования атмосферных процессов [Текст] / В.В. Пененко – Л.: Гидрометеиздат, 1981. – 351 с.
4. **Беликов, Д.А.** Исследование образования вторичных загрязнителей (озона) в атмосфере г. Томска [Текст] / Д.А. Беликов, А.В. Старченко // Оптика атмосферы и океана. – 2005. – Т. 18. № 05-06. – С. 435-443.
5. **Hurley, P. J.** The Air Pollution Model (TAPM) Version 2 [Текст] / P. J. Hurley / CSIRO Atmospheric Research Technical Paper. 2002. – № 55. – P. 37.
6. **Курбацкий, А.Ф.** Лекции по турбулентности В 2-х ч. [Текст] / А.Ф. Курбацкий – Новосибирск: Изд. Новосибирского Ун-та. – 2000. – 157 с.
7. **Лойцянский, Л.Г.** Механика жидкости и газа: Учеб. для вузов. 7-е изд., испр. [Текст] / Л.Г. Лойцянский – М.: Дрофа, 2003. – 840 с.
8. **Беликов, Д.А.** Параллельная реализация математической модели атмосферной диффузии для исследования распределения первичных и вторичных загрязнителей воздуха над урбанизированной территорией: [Текст] Дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18: защищена 05.10.06: утв. 12.01.07. / Беликов Дмитрий Анатольевич – Томск, 2006. – 177 с.
9. **Старченко, А.В.** Моделирование переноса примеси в однородном атмосферном пограничном слое [Текст] / А.В. Старченко // Труды Международной конференции ENVIROMIS-2000. Томск, октябрь, 2000, – Томск: Изд-во Томского ЦНТИ. – 2000. – С. 77–82.
10. **Moussiopoulos, N.** Numerical simulation of photochemical smog formation in Athens, Greece – A case study [Текст] / N. Moussiopoulos, P. Sahm, C. Kessler // Atmospheric Environment. – 1995. – V. 29, No.24. – P. 3619-3632.
11. **Perego, S.** Metphomod – a Numerical Mesoscale Model for Simulation of Regional Photosmog in Complex Terrain: Model Description and Application during Pollumet 1993 (Switzerland) [Текст] / S. Perego // Meteorology and Atmospheric Physic. – 1999. – V. 70. – P. 43-69.
12. **Старченко, А.В.** Применение мезомасштабных моделей MM5 и WRF к исследованию атмосферных процессов [Текст] / А.В. Старченко, Д.А. Беликов, Д.А. Вражнов, А.О. Есаулов // Оптика атмосферы и океана. – 2005. – Т. 18, № 05-06. – С. 455-461.
13. **Старченко, А.В.** Численное моделирование городской и региональной атмосферы и оценка её влияния на перенос примеси [Текст] / А.В. Старченко // Вычислительные технологии. – 2004. – Т. 9, ч. 2. – С. 98-108.
14. **Старченко, А.В.** Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха [Текст] / А.В. Старченко, Д.А. Беликов // Оптика атмосферы и океана. — 2003. – Т. 16, № 7. – С. 657–665.
15. **Самарский, А.А.** Методы решения сеточных уравнений [Текст] / А.А. Самарский, Е.С. Николаев – М.: Наука. – 1978. – 591 с.
16. **Van Leer, B.** Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second Order Scheme [Текст] / B. Van Leer // Journal of Computational Physics. – 1974. – V. 14. – P. 361-370.
17. **Илюшин, Б.Б.** Моделирование распространения примеси в конвективном пограничном слое атмосферы [Текст] / Б.Б. Илюшин, А.Ф. Курбацкий // Известия АН. Физика атмосферы и океана. 1996. – Т. 32, № 3. – С. 307–321.
18. **Willis, G.E.** A Laboratory Study of Dispersion from an Elevated Source within a Modeled Convective Planetary Boundary Layer [Текст] / G.E. Willis, J.W. Deardorff // Atmospheric Environment. 1978. – V. 12. – P. 1305-1311.