

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
ГЕОГРАФИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

Варенцов Александр Иванович

**Перенос и осаждение аэрозолей различного происхождения в
городском пограничном слое по результатам численного
гидродинамического моделирования**

Науки об атмосфере и климате (1.6.18)

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата географических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Степаненко Виктор Михайлович

Москва – 2026

Оглавление

Введение	3
Глава 1. Методы моделирования переноса и осаждения аэрозолей в городской среде	11
1.1 Аэрозольное загрязнение в городах: актуальность, мониторинг и роль математического моделирования	11
1.2 Модели переноса атмосферных примесей на разных масштабах.	14
1.3 Физико-математические основы моделирования переноса частиц.....	18
1.4 Моделирование переноса и осаждения аэрозолей в городской среде	22
1.5 Методология верификации и валидации моделей переноса	35
1.6 Заключение к главе 1	37
Глава 2. Модель лагранжева переноса частиц	39
2.1 Введение: концепция модели	39
2.2 Физико-математическая модель	40
2.3 Взаимодействие частиц с поверхностями	50
2.4 Численная реализация.....	51
2.5 Структура и алгоритм работы в автономном режиме	52
2.6 Вычислительная оптимизация	56
2.7 Верификация модели на аналитических решениях	58
2.8 Верификация модели на натурных данных	66
2.9 Кросс-верификация по данным вихреразрешающего моделирования	68
2.10 Интегрированный модуль лагранжева переноса для вихреразрешающей модели НИВЦ МГУ	76
2.11 Заключение к главе 2	81
Глава 3. Моделирование переноса аэрозолей в разных типах городской застройки на основе классификации ЛКЗ	83
3.1 Конфигурации городской застройки	83
3.2 Постановка численных экспериментов	105
3.3 Влияние городской застройки на структуру воздушного потока и характеристики турбулентности.....	109
3.4 Закономерности пространственного распределения мелкодисперсных частиц (PM _{2.5}).....	115
3.5 Чувствительность полученных зависимостей к массе и размеру частиц	135
3.6 Выводы по главе 3	137
Глава 4. Моделирование процессов осаждения частиц	140
4.1 Исследование чувствительности концентраций аэрозолей к вероятности осаждения на вертикальные поверхности	140
4.2 Моделирование осаждения частиц в городском каньоне г.Москвы: исследование на примере ЖК «Люблинский парк»	153
4.3 Выводы по главе 4.....	161
Заключение	164
Список литературы	166

Введение

Актуальность исследования

Качество атмосферного воздуха является одним из ключевых факторов, определяющих здоровье населения. Одной из главных особенностей загрязнения атмосферы в городах является его выраженная пространственная неоднородность, обусловленная сложной морфологией застройки и физико-химическими свойствами подстилающей поверхности [Sokhi et al., 2022]. Внутригородские различия в условиях переноса и накопления примесей формируют устойчивые контрасты качества воздуха на уровне отдельных районов и кварталов. Это определяет необходимость исследования процессов переноса и сухого осаждения аэрозолей не только как физической, но и как географической задачи, направленной на выявление пространственных закономерностей формирования качества воздуха в условиях неоднородной урбанизированной территории.

Для решения задач анализа и прогноза качества воздуха применяется иерархия моделей. Однако глобальные и региональные системы химико-транспортного моделирования из-за грубого пространственного разрешения сглаживают градиенты концентраций и не учитывают городскую геометрию напрямую [Monks et al., 2009]. Сетевые уличные и гауссовы модели часто ошибаются в сложной реалистичной морфологии, а методы машинного обучения, несмотря на перспективность, требуют высокодетальных данных для обучения и обладают ограниченной физической интерпретируемостью. Это обуславливает востребованность микромасштабного вихреразрешающего моделирования (LES) в связке с лагранжевым подходом для точного описания турбулентности и физики движения частиц в городской среде [Guha, 2008; Blocken, 2018].

В последние годы в качестве пространственного каркаса для анализа и моделирования городской вентиляции и загрязнения воздуха всё активнее используется классификация локальных климатических зон (ЛКЗ) [Stewart, Oke, 2012]. Изначально разработанная для исследований городского острова тепла, она позволяет типизировать застройку по её морфометрическим свойствам. Тем не менее, применимость ЛКЗ как предиктора переноса и накопления примесей в современной науке остаётся слабо изученной. Сохраняется существенная неопределённость в том, какие процессы контролируются исключительно типом ЛКЗ, а какие – характеристиками внутренней структуры застройки [Li et al., 2021; Gál et al., 2025].

Дополнительным важным фактором, зачастую игнорируемым или сильно упрощаемым в моделях качества воздуха, является сухое осаждение аэрозолей на вертикальные фасады

зданий [Mohan, 2016; Farmer et al., 2021]. Огромная площадь стен в городе выступает мощным фильтром, и отсутствие количественных оценок этого стока в застройке различных типов ведёт к искажению расчётов локального баланса массы примеси.

Таким образом, системное исследование влияния реалистичной городской морфологии на основе ЛКЗ и процессов фасадного осаждения на дисперсию аэрозолей с использованием передовых методов моделирования является актуальной научной задачей, имеющей как фундаментальное значение, так и высокую прикладную геоэкологическую и метеорологическую ценность.

Степень разработанности темы

Теоретической и методологической основой работы послужили фундаментальные труды в области физики атмосферы, городской метеорологии и моделирования переноса примесей. Основы теории атмосферной диффузии и лагранжевых стохастических моделей были заложены в классических работах O. Sutton, M.E. Берлянда, D. Thomson, B. Sawford, P. Durbin, а их развитие для условий неоднородной турбулентности представлено в исследованиях A.B. Глазунова и J.-P. Minier. Изучению структуры воздушных потоков и режимов обтекания зданий посвящены труды T. Oke, R. Britter, S. Hanna, B. Blocken.

Для анализа и прогноза качества воздуха сложилась иерархия моделей: от эйлеровых химико-транспортных (CHIMERE, CMAQ, SILAM и др.) и гауссовых уличных (AERMOD, OSPM, SIRANE) до микромасштабных (PALM, ENVI-met и др.) и методов машинного обучения – ограничения разных подходов в сложной морфологии обобщены в обзорах P. Monks, A. Baklanov и R. Sokhi. Для воспроизведения турбулентности в городском пологе всё активнее используются методы вихреразрешающего моделирования: PALM (B. Maronga), uDALES (T. Grylls) и др., подробные описания приводятся в обзорах B. Blocken и Y. Tominaga.

Современным стандартом описания городской морфологии стала классификация локальных климатических зон (ЛКЗ) I. Stewart и T. Oke, фокус применения которой расширяется от исследований острова тепла в сторону задач вентиляции и качества воздуха (M. Demuzere, T. Gál, R. Jiang, M. Amouei). Структура городской застройки, её влияние на аэродинамику и перенос примесей рассматриваются в работах P. Kastner-Klein, J. Hang, N. Nazarian, R. Plotnick, G. Boeing. Вопросы сухого осаждения аэрозолей на городские поверхности, в том числе фасады зданий, рассматривались в работах J. Seinfeld и S. Pandis, S. Mohan, W. Slinn, A. Petroff, L. Thouron и M. Kurppa.

Несмотря на значительный прогресс, применимость ЛКЗ как предиктора дисперсии примесей с учётом внутренней структуры застройки и роль фасадного осаждения в

самоочищении городского воздуха остаются освещёнными лишь частично, а их комплексное исследование на основе гибридного LES-моделирования в реалистичных морфологиях ранее не проводилось.

Объект и предмет исследования

Объектом исследования являются процессы переноса и осаждения аэрозольных частиц в городском пограничном слое атмосферы.

Предметом исследования является влияние морфологии городской застройки (описываемой в том числе классами ЛКЗ) и физических свойств частиц на их пространственное распределение и закономерности осаждения.

Цель и задачи исследования

Целью настоящей диссертационной работы является системное исследование и количественная оценка влияния морфологии городской застройки и процессов осаждения на перенос и распределение аэрозольных частиц с различными физическими свойствами на основе вихреразрешающего моделирования.

Для достижения поставленной цели были сформулированы и решены следующие **задачи**:

1) Разработать, верифицировать и внедрить в состав вихреразрешающего гидродинамического комплекса лагранжеву численную модель, корректно воспроизводящую пространственную структуру переноса и осаждения частиц и применимую в сложной геометрической среде города.

2) Сформировать набор идеализированных и реальных (на примере г. Москвы) конфигураций городской застройки различных классов локальных климатических зон (ЛКЗ) для исследования их влияния на особенности атмосферного перемешивания и дисперсии примесей.

3) Выявить количественные закономерности связи характеристик поля концентрации аэрозолей с типом ЛКЗ и оценить применимость классификации ЛКЗ в качестве предиктора характеристик аэрозольного загрязнения.

4) Оценить роль осаждения на вертикальные фасады в формировании пространственной структуры загрязнения и сопоставить значимость этого фактора с влиянием основных физических свойств (размера и массы) самих частиц.

Методы исследований.

Основой исследования является метод численного моделирования физических процессов. Динамика атмосферных течений и турбулентности с явным разрешением

крупномасштабных вихревых структур рассчитывалась с помощью вихререзающей модели (LES-модели НИВЦ МГУ и ИВМ РАН). Для описания траекторий аэрозольных частиц применялась разработанная автором лагранжева стохастическая модель. Системное исследование влияния геометрии застройки на перенос аэрозолей проводилось на основе классификации локальных климатических зон (ЛКЗ) с привлечением различных морфометрических параметров городской геометрии, в том числе индекса фронтальной площади, анизотропии и пространственной упорядоченности. Анализ результатов численных экспериментов выполнялся с использованием методов математической статистики.

Научная новизна.

1) Разработана и представлена новая численная модель переноса и осаждения аэрозольных частиц, сопрягающая лагранжев подход с вихререзающей гидродинамической моделью пограничного слоя атмосферы. Доказана применимость модели для задач исследования пространственной структуры концентраций и сухого осаждения частиц, обосновано её использование в сложной геометрической среде города.

2) Впервые количественно выявлено качественное изменение доминирующих факторов переноса аэрозолей в зависимости от морфологической упорядоченности застройки: установлено, что в регулярных конфигурациях с выраженным направлением городских каньонов ключевую роль играет анизотропия и ориентация относительно ветра, тогда как в нерегулярной среде (рандомизированной и реальной застройке Москвы) определяющим становится влияние изотропных макропараметров района (тип ЛКЗ), нивелирующее локальные направленные эффекты.

3) Доказано, что классификация ЛКЗ выступает не только инструментом параметризации, но и устойчивой географической основой для типизации условий формирования качества воздуха. Установлено, что для высокоточного анализа ЛКЗ как предиктор необходимо дополнять метриками пространственной хаотичности, анизотропии застройки и зависимой от направления ветра фронтальной площади.

4) Получены новые количественные оценки, характеризующие фасады зданий как значимый сток примеси (до 70% от бюджета сухого осаждения), формирующий внутригородскую неоднородность концентраций аэрозолей, представляющих фракции UFP, PM_{2.5} и PM₁₀. Показано для данных фракций, что неопределённость в параметризации взаимодействия частиц со стенами может вносить в изменчивость полей концентрации вклад, значительно превышающий эффект от вариации размера и массы частиц, при этом сам процесс

формирования загрязнения на фасадах в реальной застройке демонстрирует высокую чувствительность к направлению ветра и локализации источников.

Теоретическая и практическая значимость результатов.

Результаты позволяют интерпретировать различия в переносе аэрозолей как проявление пространственной дифференциации городской среды, обусловленной типом застройки. Это открывает путь к созданию новых методов геоэкологического анализа и районирования территорий по условиям самоочищения атмосферы. Также ценность результатов заключается в возможности совершенствования и прогностических моделей качества воздуха, в том числе на основе методов машинного обучения, за счёт учёта описанных связей ЛКЗ и характеристик концентраций в городском пологе и найденных ограничений применимости ЛКЗ в условиях регулярной и хаотичной застройки. Количественные показатели затухания шлейфа для разных ЛКЗ могут быть использованы в территориальном планировании для минимизации рисков при размещении жилых массивов. Разработанная модель является готовым инструментом для решения задач экологического мониторинга и прогноза в условиях реальной плотной застройки.

Основные защищаемые положения

1) Разработанная лагранжева модель переноса и осаждения аэрозолей, сопряжённая с вихререзающей моделью пограничного слоя атмосферы, верифицирована и позволяет воспроизводить детальную пространственную структуру полей концентрации и осаждения частиц в городской застройке.

2) Пространственное распределение аэрозолей в городской застройке зависит от её морфометрических параметров: в регулярной застройке с выраженной ориентацией каньонов (высокой анизотропией) решающую роль играют характеристики, зависящие от направления ветра, а в нерегулярной – изотропные интегральные показатели, не связанные с направлением воздушного потока.

3) Тип локальной климатической зоны служит важным предиктором пространственного распределения аэрозолей в городском пограничном слое и наиболее информативен в случае фонового (удалённого) источника частиц.

4) Сухое осаждение на вертикальные стены зданий является одним из ключевых механизмов удаления примеси из воздуха в городском пологе и обеспечивает до 70% суммарного потока осаждения. Для рассмотренных моноразмерных аэрозолей с аэродинамическим диаметром не более 5 мкм (представители фракций UFP, PM_{2.5} и PM₁₀)

учёт этого процесса оказывает на пространственное распределение концентраций влияние, сравнимое с эффектом вариации размера и массы частиц или превосходящее его.

Личный вклад автора

Все основные результаты диссертационного исследования получены автором лично. Автором самостоятельно разработана физико-математическая и программная реализация лагранжевой модели, проведены её тестирование и верификация, осуществлена интеграция в вихреразрешающую модель НИВЦ МГУ и ИВМ РАН. Выбраны территории моделирования и созданы конфигурации застройки, проведён анализ их геометрии, разработан генератор псевдослучайной застройки. Спланированы и проведены все серии численных экспериментов, выполнен анализ и интерпретация результатов, сформулированы основные выводы и положения, выносимые на защиту.

Степень достоверности и апробация результатов.

Достоверность результатов обеспечивается применением строгого физико-математического моделирования для описания процессов переноса и осаждения аэрозолей, многоуровневой верификацией разработанной лагранжевой модели по аналитическим решениям, данным натурных измерений и путём кросс-верификации с независимой эталонной LES-моделью. В качестве пространственного каркаса для классификации застройки применяется широко используемая в городской климатологии система локальных климатических зон (ЛКЗ). Полученные результаты основаны на корректной статистической обработке и анализе данных численных экспериментов.

Основные результаты диссертации докладывались на 12 всероссийских и международных конференциях, семинарах и школах, в том числе на международных конференциях по городскому климату ICUC-11 и ICUC-12 (Сидней, 2023; Роттердам, 2025), генеральных ассамблеях EGU (Вена, 2021; 2022), международной школе ERCA-2024 (Гренобль, 2024), на семинаре Гидрометцентра России, а также на конференциях CITES и ENVIROMIS. Результаты диссертации использовались при выполнении работ по 10 проектам и грантам РФФИ, РНФ и других организаций.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 7 научных работ, в том числе 4 статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности Науки об атмосфере и климате (1.6.18), и 12 тезисов в сборниках материалов всероссийских и международных конференций.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложений. Общий объем работы составляет 181 страницу, включая 62 рисунка и 9 таблиц. Список литературы насчитывает 187 наименований.

Во введении обосновывается актуальность темы, формулируются цель и задачи, защищаемые положения, научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе представлен обзор литературы по методам моделирования переноса и осаждения аэрозолей в городской среде, проанализированы подходы к описанию геометрии городской поверхности и существующие исследования о её влиянии на аэрозольное загрязнение, обоснован выбор лагранжева подхода для описания переноса частиц и классификации ЛКЗ для описания городской морфологии в качестве ключевых инструментов исследования.

Во второй главе подробно описывается разработанный численный инструмент – модель лагранжева переноса частиц. Представлены её физико-математические основы, программная реализация и результаты многоуровневой верификации по аналитическим, натурным и численным эталонным данным.

В третьей главе представлены результаты системного исследования влияния морфологии городской застройки на перенос аэрозольных частиц. На основе серии численных экспериментов для регулярных, рандомизированных и реальных московских конфигураций застройки, соответствующих разным типам ЛКЗ, выявляются ключевые факторы, определяющие пространственное распределение примеси, и оценивается применимость ЛКЗ в качестве предиктора параметров этого распределения.

В четвертой главе исследуется роль процесса сухого осаждения частиц на вертикальные поверхности зданий. Проводится оценка чувствительности полей концентрации к параметрам фасадного осаждения, анализ распределения бюджета сухого осаждения по разным типам городской поверхности и сравнение расчётов модели с данными уникальных натурных измерений осаждения в городском каньоне г. Москвы.

В заключении сформулированы основные выводы и результаты диссертационного исследования.

Благодарности

Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю В.М. Степаненко и научному консультанту Е.В. Мортикову за постановку исследовательских задач и поддержку на пути к их решению, сотрудникам кафедры метеорологии и климатологии Географического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, лабораторий суперкомпьютерного

моделирования природно-климатических процессов и математического моделирования геофизических пограничных слоёв НИВЦ МГУ за конструктивные советы при подготовке диссертации, Глазунову А.В. и Дебольскому А.В. за ценные комментарии и советы при разработке теоретической основы и практической реализации модели переноса частиц, Кошелевой Н.Е. за любезное предоставление данных измерений пылевых выпадений на зданиях для анализа в данной диссертации, Савенко А.В. за помощь на этапе подачи работы. Также автор благодарит своих близких за неоценимую помощь в период работы над диссертацией, в частности Н.Е. Варенцову за постоянную всестороннюю поддержку, а также И.М. Варенцова, С.А. Варенцову, М.И. Варенцова, Н.А. Варенцову и свою собаку Цири.

Глава 1. Методы моделирования переноса и осаждения аэрозолей в городской среде

1.1 Аэрозольное загрязнение в городах: актуальность, мониторинг и роль математического моделирования

В последние десятилетия интерес к исследованиям состава атмосферы и его моделированию значительно возрос. Эта тенденция обусловлена несколькими факторами: повышением осведомленности о рисках для здоровья человека из-за загрязнения воздуха, углублением понимания механизмов изменения климата, а также ростом вычислительных возможностей, позволяющих проводить всё более детальные модельные исследования физико-химических процессов в атмосфере. По данным Всемирной организации здравоохранения, загрязнение воздуха является причиной около 7 миллионов преждевременных смертей ежегодно, что составляет значительную долю в общей структуре смертности [World Health Organization, 2012; Sokhi et al., 2022]. Влияние концентраций $PM_{2.5}$ на смертность особенно ярко выражено в странах с низким и средним уровнем дохода, где процессы урбанизации протекают наиболее активно [Cohen et al., 2017]. Решение проблем качества воздуха требует применения разномасштабных подходов, которые связывают процессы обтекания отдельных зданий с циркуляцией в масштабе всего города [Blocken, 2015; Kadaverugu et al., 2019].

Проблема контроля и прогнозирования качества воздуха актуальна на всех пространственных масштабах, однако наибольшую остроту она приобретает в городах. Именно в урбанизированных районах сочетаются высокая плотность населения, большое количество и разнообразие антропогенных источников эмиссии, сложная геометрия подстилающей поверхности и, как следствие, крайне неоднородная структура атмосферных течений [Borck, Schrauth, 2021].

Основными загрязняющими веществами, определяющими качество городского воздуха, являются оксиды серы (SO_2), оксиды азота (NO_x), угарный газ (CO), приземный озон (O_3) и, в особенности, взвешенные частицы (Particulate Matter, PM) [Fenger, 1999]. Взвешенные частицы, или атмосферные аэрозоли, представляют собой сложную смесь твердых и жидких частиц разного происхождения, размера и химического состава (см. рис. 1.1). Особое внимание уделяется фракциям PM_{10} (частицы с аэродинамическим диаметром менее 10 мкм) и $PM_{2.5}$ (менее 2.5 мкм), поскольку они способны проникать в дыхательную систему человека и вызывать серьезные заболевания [Tan, 2021].

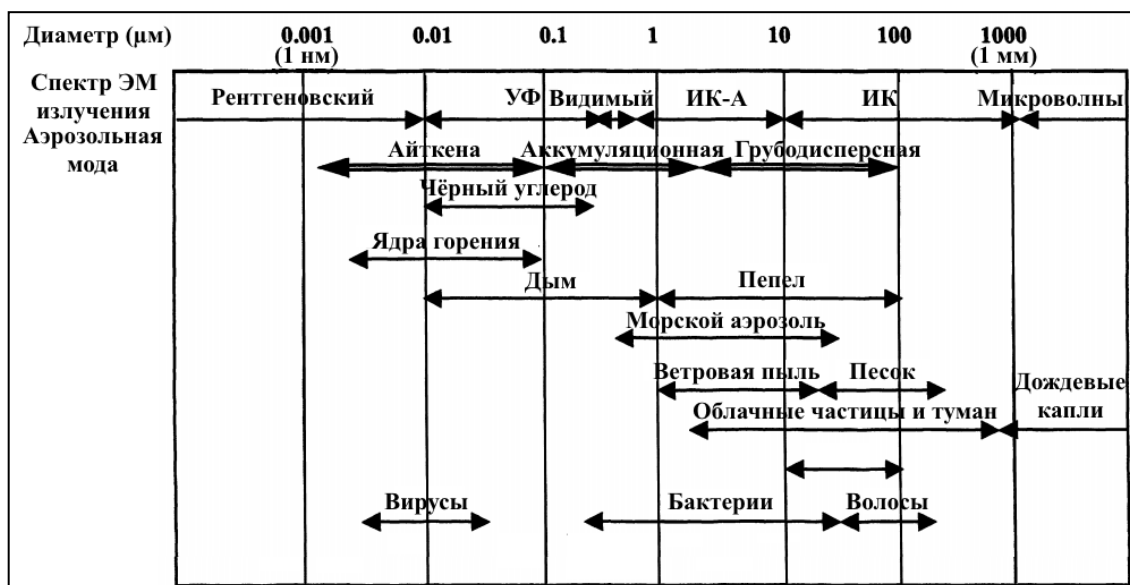


Рисунок 1.1. Размеры и наиболее распространённые виды атмосферного аэрозоля [Marley, 2006].

Для своевременной минимизации негативного воздействия загрязнителей необходимы эффективные системы мониторинга [Marinov et al., 2016]. Традиционно для этой цели используются сети наземных стационарных станций. Однако даже в хорошо обеспеченных мегаполисах, таких как Москва (рис. 1.2), плотность таких сетей недостаточна для адекватной оценки пространственной изменчивости полей концентраций. Станции, расположенные в разных условиях (в парках, вблизи автомагистралей, в жилых районах), не могут считаться репрезентативными для всей окружающей территории, что не позволяет строить по их данным детальные карты загрязнения [Тасейко, Сугак, 2014; Кульбачевский, 2021]. Планирование и оптимизация сетей мониторинга сами по себе требуют специальных методов анализа чувствительности [Репенко et al., 2021]. Как показывают исследования на примере сети Мосэкомониторинга, пространственный масштаб корреляции измеренных концентраций значительно меньше шага сетки современных региональных моделей, что обусловлено высокой мозаичностью городского ландшафта [Ponomarev et al., 2021].

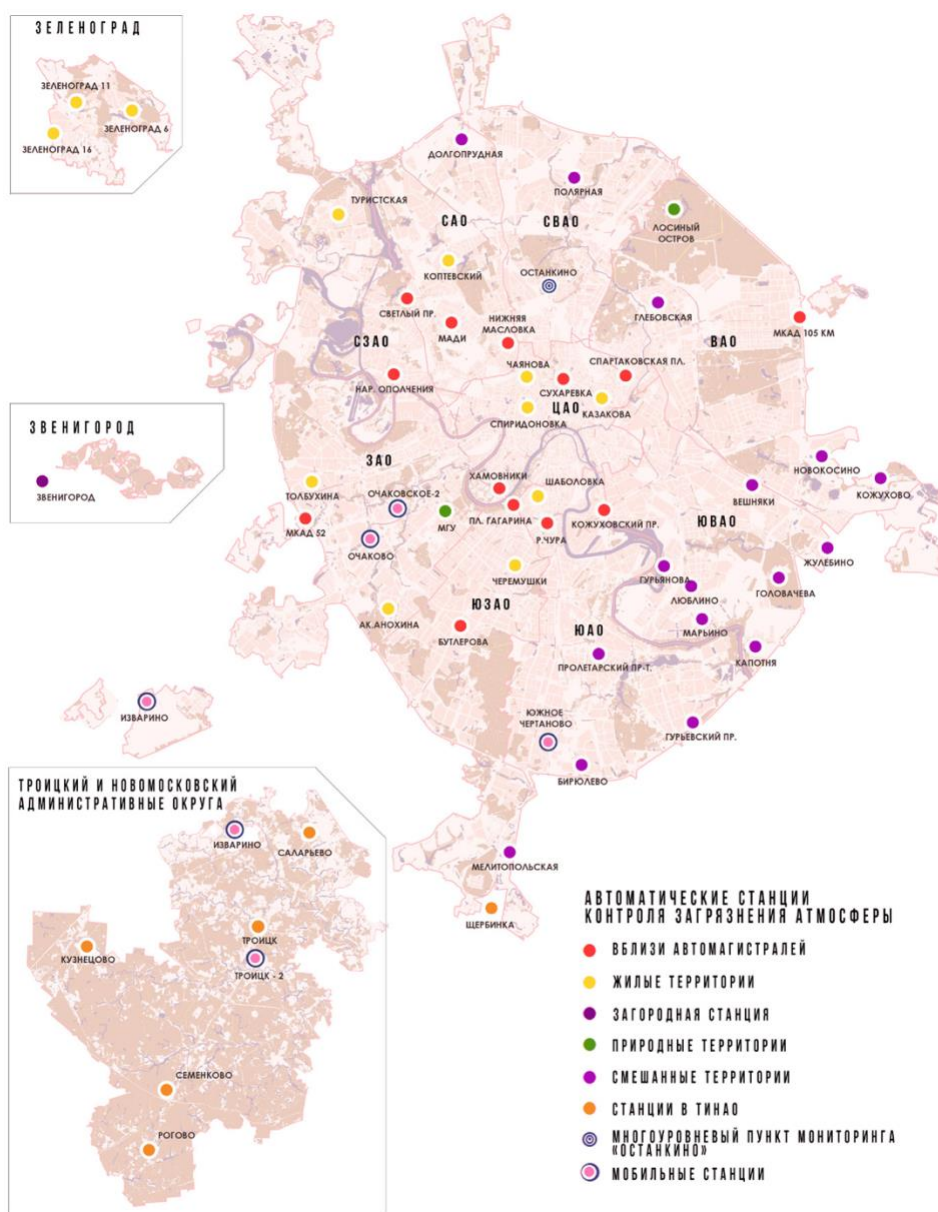


Рисунок 1.2. Схема расположения автоматических станций контроля загрязнения атмосферы на территории Москвы и Московской области [Кульбачевский, 2021].

В качестве альтернативы развиваются методы мобильного мониторинга с использованием портативных датчиков. Маршрутные измерения позволяют получать данные с высоким пространственным разрешением вдоль заданной траектории (рис. 1.3), но сталкиваются с проблемой асинхронности измерений в разных точках и, как правило, не позволяют восстановить двумерное или трехмерное поле концентраций [Birmili et al., 2013; Klemm et al., 2022]. Дистанционные методы, такие как спутниковое зондирование, способны покрывать большие территории, но их пространственное разрешение и точность обычно слишком низкие для детального анализа качества воздуха на уровне отдельных улиц и

кварталов [Marć, 2015; Li, 2019]. В то же время, как будет показано далее, для верификации современных моделей высокого разрешения, описывающих качество воздуха на уровне города, именно данные мобильного мониторинга становятся всё более востребованными [Zhang et al., 2021; Du et al., 2024]. Экспериментальные исследования в реальных городских каньонах также требуют развертывания плотных сетей датчиков для улавливания локальных особенностей распределения примеси, которые невозможно зафиксировать с помощью стандартных станций мониторинга [Karra et al., 2011].

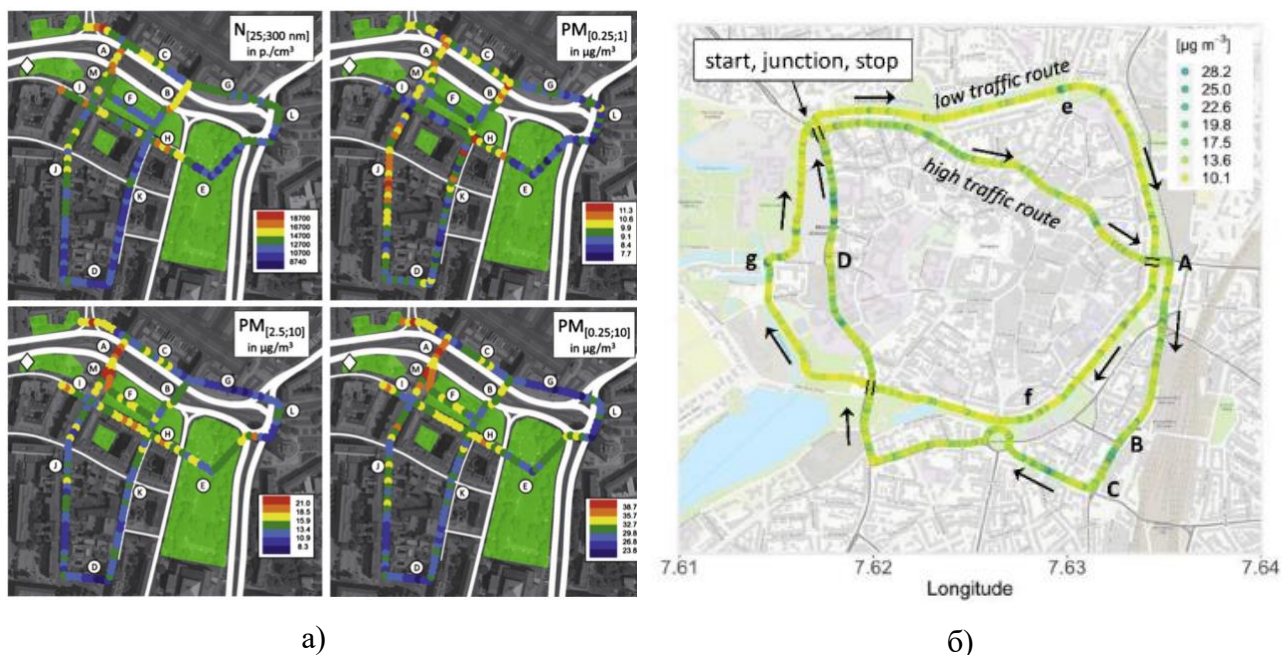


Рисунок 1.3. Концентрации частиц различных размеров по данным маршрутных измерений с высоким пространственным разрешением внутри городской застройки Лейпцига (а) и Мюнстера (б) [Birmili et al., 2013; Klemm et al., 2022].

Таким образом, существующие методы измерений, несмотря на их безусловную важность, не способны предоставить полную, трехмерную и синхронную картину распределения загрязняющих веществ в сложной городской среде. Этот пробел восполняется с помощью физико-математического моделирования, которое является мощным инструментом как для прикладных задач анализа и прогноза, так и для фундаментальных исследований физико-химических процессов, управляющих переносом примесей в атмосфере [Baklanov, 2020].

1.2 Модели переноса атмосферных примесей на разных масштабах.

Проблема загрязнения городского воздуха носит многомасштабный характер, охватывая процессы от межконтинентального переноса воздушных масс до локальных завихрений вокруг

отдельных архитектурных элементов. В связи с этим в современной науке сформировалась иерархическая система моделей, каждая из которых решает специфические задачи на своем пространственно-временном уровне [Sokhi et al., 2022].

Глобальные и региональные модели.

Для оценки дальнего переноса, фоновых концентраций и сложных фотохимических превращений традиционно применяются эйлеровы химико-транспортные модели (Chemical Transport Models, CTM) глобального и регионального масштабов. К числу наиболее распространенных систем относятся CHIMERE [Mailler et al., 2017], CMAQ [Pleim, 2022], GEOS-Chem и основанная на ней прогностическая система GEOS-CF [Keller et al., 2021], а также модель IFS-COMPO Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды [Rémy et al., 2024]. Для решения региональных задач также широко применяются модели SILAM [Sofiev et al., 2006; Kouznetsov et al., 2026], COSMO-ART [Chubarova et al., 2022] и WRF-Chem [Liao et al., 2014].

Эти модели обладают детализированными термодинамическими и химическими модулями, позволяющими рассчитывать формирование вторичных аэрозолей и коагуляцию частиц в атмосфере [Rémy et al., 2024]. Однако их фундаментальным ограничением является низкое пространственное разрешение: шаг горизонтальной сетки обычно составляет от 1 до 25 км. В таких моделях городская застройка не разрешается явно, а параметризуется лишь как плоская поверхность с повышенной шероховатостью [Monks et al., 2009]. Это приводит к возникновению серьёзной «ошибки репрезентативности»: модель сильно сглаживает поля концентраций, не улавливая мозаичность городского ландшафта, эффекты уличных каньонов и локальные застои примесей [Keller et al., 2021]. Как показывают сравнения концентраций примесей с данными сети Мосэкомониторинга, ошибки расчётов региональных моделей (например, SILAM) для Москвы могут достигать сотен процентов из-за неспособности описать внутригородские градиенты [Ponomarev et al., 2021]. При этом показано, что эти ошибки не являются случайным белым шумом, а статистически нестационарны, имеют значительное время жизни и зависят от сезона и суточного цикла фотохимических реакций и турбулентного перемешивания, что усложняет их прямую коррекцию стандартными процедурами ассимиляции. Более того, крупномасштабные схемы сухого осаждения в таких моделях часто игнорируют колоссальную площадь разных поверхностей зданий, что ведет к искажению локального баланса массы аэрозолей [Petroff, Zhang, 2010; Pleim et al., 2022].

В последние годы для преодоления ограничений макромоделей активно развивается концепция мультимасштабного моделирования (подходы «model fusion» или «street-in-grid»)

[Sokhi et al., 2022]. В рамках этой парадигмы результаты расчётов региональных моделей (например, WRF или CMAQ) используются в качестве начальных и граничных условий для микромасштабных моделей [Viesso et al., 2021]. Это позволяет связать крупномасштабный атмосферный перенос с локальной аэродинамикой конкретных городских структур.

Микромасштабные модели.

Для преодоления ограничений региональных сеток применяются микромасштабные методы вычислительной гидродинамики (Computational Fluid Dynamics, CFD), способные явно разрешать трёхмерную геометрию зданий. В этой категории выделяются два распространённых подхода: RANS (усредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса) и LES (вихреразрешающее моделирование).

RANS-модели, такие как ENVI-met [Bruse, Fleer, 1998] или различные решатели на базе $k - \epsilon$ замыканий, остаются наиболее массовым инструментом в урбанистике из-за их вычислительной экономичности [Pantusheva et al., 2022; Старченко и др., 2022]. Они рассчитывают усреднённые стационарные поля ветра и турбулентности. Однако стандартные RANS-модели фундаментально предполагают изотропию турбулентности, что приводит к переоценке турбулентной кинетической энергии на наветренных фасадах и неспособности достоверно описать дисперсию в зонах аэродинамического следа за зданиями [Tomimaga, Stathopoulos, 2013]. В последнее время предпринимаются попытки расширить возможности RANS-моделей за счёт внедрения лагранжевых модулей. Так, для модели ENVI-met была разработана стохастическая лагранжева модель LaStTraM, позволяющая рассчитывать прямые и обратные траектории частиц на основе предварительно рассчитанных RANS-полей [Simon et al., 2021]. Этот подход обеспечивает более детальное описание дисперсии в сложной застройке по сравнению с чисто эйлеровым переносом, однако точность результатов остаётся ограниченной качеством самих осреднённых полей ветра и турбулентности. В результате RANS часто даёт существенные ошибки в концентрациях и осаждении частиц в областях рядом с поверхностями зданий, так как искажает градиенты в вязком подслое [Zhang, Chen, 2009].

LES-модели (Large-Eddy Simulation), напротив, напрямую рассчитывают крупные нестационарные вихри, ответственные за большую часть переноса импульса и массы, параметризуя лишь подсеточную мелкомасштабную турбулентность. К числу передовых систем этого класса относится модель PALM [Maronga et al., 2020], а также микромасштабные решатели uDALES [Grylls et al., 2019] и модификации OpenFOAM [Cheng, Fu, 2025]. Многочисленные сравнительные обзоры подтверждают превосходство LES над RANS в

задачах оценки качества воздуха [Blocken, 2018]. Именно вихререзающий подход способен зафиксировать порывистость ветра, меандрирование плюма (шлейфа) загрязнителей на перекрестках и нестационарные процессы вертикального выноса примеси из глубоких уличных каньонов, что делает его оптимальным выбором для исследования гетерогенной застройки [Du et al., 2024].

Лагранжевы траекторные, гауссовы модели, модели уличных сетей.

Между макро- и микромасштабными моделями существует класс оперативных и параметрических подходов, разработанных для быстрого расчета концентраций или траекторий при приемлемых вычислительных затратах.

Макро-лагранжевы или траекторные модели. К ним относятся отраслевые стандарты HYSPLIT [Stein et al., 2015], FLEXPART [Bakels et al., 2024], NAME и другие. Они могут отслеживать миллионы макрочастиц или гауссовых облаков, обеспечивая хорошие результаты для расчёта дальнего переноса пыли, вулканического пепла или радионуклидов. Тем не менее, поскольку они используют метеорологические поля региональных или глобальных моделей, они физически не способны рассчитывать огибание потоком отдельных зданий и улиц.

Гауссовы модели (модели шлейфа). Являются исторически первыми и наиболее простыми аналитическими инструментами, рассчитывающими дисперсию примеси от источника в виде расширяющегося конуса с нормальным (гауссовым) распределением концентраций [Sutton, 1932; Берлянд, 1975; Vardoulakis et al., 2003]. К наиболее распространённым регуляторным моделям этого класса относятся AERMOD (Агентство по охране окружающей среды США), включающая алгоритм PRIME для учёта аэродинамического следа зданий, и ADMS (Cambridge Environmental Research Consultants), использующая профили подбоя пограничного слоя с расширенными модулями обтекания препятствий. Они вычислительно крайне доступны и до сих пор применяются в ситуациях, когда отсутствуют ресурсы для CFD-расчетов или нет детальных данных о геометрии или течении [Kakosimos et al., 2010]. Однако базовая гауссова модель не способна огибать сложные препятствия и учитывать отрывные течения сложной городской морфологии [Vardoulakis et al., 2003].

Модели уличных сетей: Оперативные модели, такие как OSPM [Kakosimos et al., 2010], SIRANE [Soulhac et al., 2011] и MUNICH [Kim et al., 2022], комбинируют гауссовский плюм для расчета прямого переноса с балансовыми уравнениями (box model) для оценки рециркуляции внутри каньона. Они чрезвычайно эффективны для регулярных, симметричных уличных сетей. Однако валидация с помощью LES показала, что они систематически

ошибаются в сложной, асимметричной морфологии (короткие улицы, нестандартные перекрестки, перепады высот) и сильно занижают локальную экспозицию пешеходов на тротуарах у фасадов [Grylls et al., 2019].

Подходы к моделированию качества воздуха на основе машинного обучения.

В последние годы наблюдается взрывной рост применения алгоритмов машинного обучения (Machine Learning, ML), в том числе регрессии землепользования (Land-Use Regression, LUR), для прогнозирования концентраций $PM_{2.5}$ и других загрязняющих веществ. Наиболее часто применяются нейросети (LSTM) для временного прогнозирования и ансамблевые методы деревьев решений (Random Forest, XGBoost) для пространственной интерполяции [Rybarczyk, Zalakeviciute, 2018; Essamlali et al., 2024].

Современные ML-модели достигают высокой точности благодаря интеграции пространственных микромасштабных предикторов, в частности, свойств или классов подстилающей поверхности и городской застройки, например, значений плотности застройки или классов Локальных климатических зон (ЛКЗ). Исследования доказывают, что добавление 3D-параметров геометрии (высота, плотность зданий, фактор видимости неба) кардинально улучшает статистический прогноз по сравнению с плоскими картами землепользования [Lu et al., 2021; Amouei, 2023; Yang et al., 2025].

Главным ограничением ML-подходов является их природа «чёрного ящика»: они выявляют статистические закономерности, но не объясняют физико-механические причины обтекания и дисперсии [Venkatraman Jagatha et al., 2024]. Кроме того, они критически зависят от объёма обучающей выборки и не способны предсказывать экстремальные или нетипичные ситуации, не имеющие аналогов в наблюдениях [Rybarczyk, Zalakeviciute, 2018]. Таким образом, статистические модели констатируют факт влияния геометрии на качество воздуха, но для понимания аэродинамических механизмов этого влияния необходимо физико-математическое моделирование.

1.3 Физико-математические основы моделирования переноса частиц

Исторически моделирование переноса загрязнителей началось с эмпирической модели гауссовского шлейфа [Sutton, 1932], которая позже была усовершенствована в работе [Берлянд, 1975]. Однако с развитием вычислительной техники и ростом сложности задач на смену эмпирическим моделям пришли гидродинамические модели, в которых явно воспроизводятся процессы переноса и диффузии на основе эйлера и лагранжева подходов.

Эйлеров подход описывает концентрацию примеси, как функцию пространственных координат и времени; после дискретизации дифференциальных уравнений — в фиксированных точках пространства (ячейках расчетной сетки). Основным инструментом является уравнение адвекции-диффузии, которое в осреднённом виде выглядит следующим образом [Glazunov et al., 2016]:

$$\frac{\partial \langle s \rangle}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} K_s \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial x_i} + Q_s, \quad (1.1)$$

где $\langle s \rangle$ — осреднённая по Рейнольдсу (по статистическому ансамблю реализаций или достаточно большой пространственно-временной области) концентрация, t — время, u_i — i -ая компонента скорости потока, x_i — i -ая прямоугольная декартова координата, K_s — коэффициент турбулентной диффузии, Q_s — сумма источников, стоков и воздействий, масштаб которых меньше области осреднения. Этот подход удобен для моделирования химических реакций и переноса газовых примесей, а также позволяет явно получать поля концентраций [Gouesbet, Berlemont, 1999].

Лагранжев подход, напротив, отслеживает траектории отдельных взвешенных частиц (или представленных в виде жидких в гидродинамическом смысле частиц и связанных с ними «порций» рассматриваемого вещества) в потоке (рис. 1.4). Движение каждой частицы описывается системой уравнений, базовым из которых является уравнение для её векторной координаты [Thomson, 2012]:

$$d\mathbf{x}_p = \mathbf{u}_p dt, \quad (1.2)$$

где \mathbf{u}_p — скорость частицы, которая может отличаться от скорости потока, \mathbf{x}_p — её координата, t — время. Этот подход более информативен, чем эйлеров, так как знание траекторий позволяет вычислить любые статистические величины, включая поля концентраций. Он позволяет явным образом учитывать силы, действующие на каждую частицу (инерция, гравитация, и др.), что делает его особенно ценным для моделирования аэрозолей с разнообразными физическими свойствами. Например, этот подход позволяет детально анализировать зависимость осаждения от размера частиц и начальных условий их выброса (например, при кашле или дыхании) в таких сложных геометриях, как салон самолета [Wang et al., 2011]. Также лагранжев подход позволяет явно решать задачу нахождения обратных траекторий частиц, что в эйлеровом подходе возможно лишь с дополнительными допущениями. Однако лагранжев подход, как правило, более требователен к вычислительным ресурсам, так как для получения статистически значимых полей концентрации необходимо отслеживать большое количество частиц [Thomson, 2012].

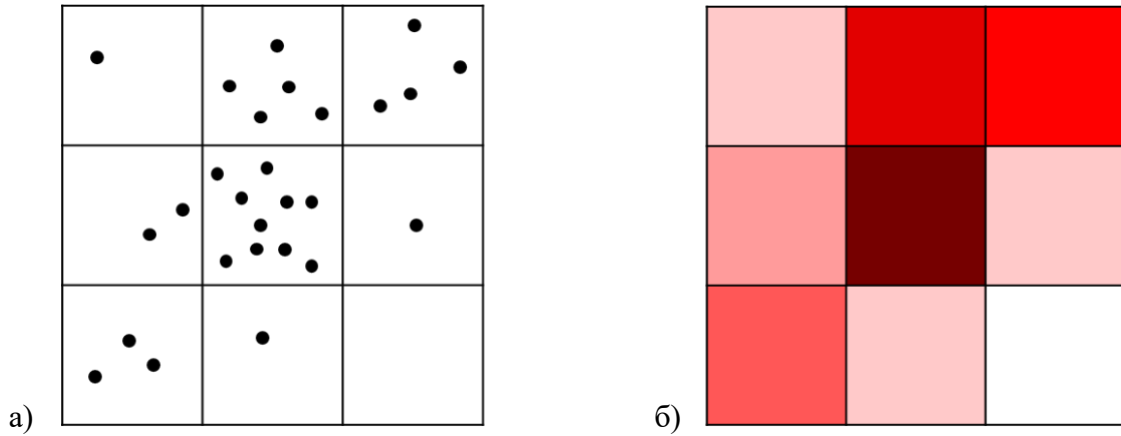


Рисунок 1.4. Схематическое изображение лагранжева (а) и эйлерова (б) подходов на дискретной пространственной сетке. В ячейках сетки изображены отдельные частицы (а) и средние для каждой ячейки значения концентрации (б).

Одной из центральных проблем при моделировании переноса примесей является учет влияния турбулентности. В большинстве практических моделей, таких как RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) или LES (Large Eddy Simulation), разрешаются только осредненные или крупномасштабные движения потока. Влияние мелкомасштабных, подсеточных турбулентных флуктуаций на траектории частиц требует специальной параметризации. Для этой цели в лагранжевом подходе используются стохастические модели [Sawford, 1991; Thomson, 2012].

Простейший класс таких моделей – стохастические модели нулевого порядка, или модели случайных блужданий (Random Walk Models). В них предполагается, что турбулентное смещение на каждом шаге по времени не зависит от предыдущего. Наиболее теоретически обоснованной моделью этого класса является модель случайных смещений (Random Displacement Model, RDM). В ней смещение частицы за шаг по времени dt описывается уравнением [Durbin, 1983; Glazunov, 2016]:

$$dx_{p_i} = \langle u_i \rangle dt + \frac{\partial K_s}{\partial x_i} dt + \sqrt{2K_s} dW_i, \quad (1.3)$$

где x_{p_i} – проекция радиус-вектора частицы на i -ую ось, $dW_i = \xi_{p_i}$ – приращение винеровского случайного процесса (нормально распределённая нескоррелированная по времени случайная величина с нулевым средним и дисперсией, равной \sqrt{dt} , имитирующая стохастическое влияние турбулентности на траекторию частицы). Ключевое достоинство этой модели заключается в том, что при условии стремящегося к нулю шага по времени она обеспечивает

эквивалентность полей концентрации, полученных лагранжевым и эйлеровым методами [Durbin, 1983; Boughton et al., 1987].

Более сложным и физически полным является класс стохастических моделей первого порядка, которые описывают эволюцию не координаты, а скорости флуктуации. Самой известной моделью этого класса является уравнение Ланжевена, которое в общей форме можно записать так:

$$d\mathbf{u}_p = \mathbf{a}(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p, t)dt + b(\mathbf{x}_p, \mathbf{u}_p, t)dW, \quad (1.4)$$

где \mathbf{a} – член, описывающий детерминированный дрейф (например, затухание флуктуации), и b – член, описывающий амплитуду взаимодействий частицы со случайным турбулентным течением. Уравнение (1.4) решается в системе с (1.2). Этот подход позволяет учесть временную корреляцию воздействующих на частицу турбулентных флуктуаций, что более реалистично описывает взаимодействие частицы с одним и тем же вихрем (организованной структурой) на протяжении некоторого времени [Rodean, 1996; Wilson, Sawford, 1996].

При построении лагранжевых моделей возникает фундаментальная теоретическая проблема – «условие хорошего перемешивания» (УХП, well-mixed condition), сформулированное в работе [Thomson, 1987]. Его суть заключается в том, что если в начальный момент времени частицы примеси равномерно распределены в пространстве, то корректная стохастическая модель должна сохранять это равномерное распределение с течением времени. Простейшие формы уравнения Ланжевена не удовлетворяют этому условию в неоднородном турбулентном потоке, что может приводить к нефизичному ложному перетеканию и накоплению частиц. Это обстоятельство стимулировало разработку более сложных форм лагранжевых стохастических моделей (ЛСМ), которые бы удовлетворяли условию УХП [Flesch et al., 1995]. Приведённые выше формулы лагранжева подхода даются для безынерционных (пассивных) частиц, т.е. таких, которые движутся вместе с потоком. Однако лагранжевы модели могут быть применимы и для инерционных частиц, т.е. таких, которые за счёт собственной инерции могут значительно отклоняться от воздушного потока, например, за счёт модификации коэффициентов в уравнении Ланжевена [Minier, Peirano, 2001]. Пример модели для инерционных частиц будет предложен в данной работе позже.

Принципиальное значение при моделировании дисперсии в сложной городской среде имеет выбор между эйлеровым и лагранжевым подходами. Эйлеров подход, основанный на уравнениях адвекции-диффузии, подвержен проблеме нефизичной численной диффузии,

особенно при моделировании переноса от точечных источников или в зонах резких градиентов у кромок зданий [Guha, 2008; Nordam et al., 2023]. Более того, для представления полидисперсного городского аэрозоля эйлерова модель требует введения дополнительных уравнений для каждого размерного класса частиц, что значительно увеличивает объём вычислительных ресурсов [Nordam et al., 2023]. Лагранжев подход частично лишён этих недостатков: он явным образом отслеживает индивидуальную инерцию частиц в турбулентном потоке, но тоже зависит от рассчитанных полей турбулентных характеристик, особенно для безынерционных частиц [Guha, 2008]. Для микромасштабного городского моделирования важно, что лагранжев трекинг позволяет вводить детальные стохастические граничные условия взаимодействия со стенкой (отскок или прилипание), что критически необходимо для оценки сухого осаждения аэрозолей на различные поверхности [Talebmoustaph et al., 2024]. Использование гибридных эйлерово-лагранжевых моделей, где воздушный поток разрешается методами CFD (особенно LES), а дисперсия частиц – лагранжевым трекингом, обеспечивает наиболее точное воспроизведение захвата примеси в зонах аэродинамического следа за препятствиями [Tominaga, Stathopoulos, 2013; Lo Giudice et al., 2019]. В сравнительных расчётах для периодических уличных каньонов показано, что лагранжевы модели оптимальны по балансу точности и вычислительных затрат для описания турбулентного переноса аэрозольных фракций в городской застройке [Глазунов, 2018].

1.4 Моделирование переноса и осаждения аэрозолей в городской среде

Структура потока в городском пограничном слое.

Перенос и распределение аэрозолей в городах – это результат сложного взаимодействия между свойствами самих частиц и уникальными характеристиками городского пограничного слоя (ГПС) атмосферы. В отличие от потока над ровной или гладкой холмистой местностью, воздушные течения в городской среде кардинально трансформируются под влиянием застройки, что требует особых подходов к моделированию. Городская застройка оказывает мощное механическое и термическое воздействие на атмосферный пограничный слой. Это приводит к формированию особой структуры потока в нижней части ГПС, которую условно можно разделить на два слоя: слой городского полога и слой городской шероховатости (Oke, 1988; Britter и Hanna, 2003).

Слой городского полога (Urban Canopy Layer, UCL) занимает пространство от поверхности земли до средней высоты крыш зданий. В этом слое воздушный поток сильно замедляется, его кинетическая энергия трансформируется в энергию турбулентных вихрей, а

структура течения полностью определяется локальной геометрией улиц и зданий. Слой городской шероховатости (Urban Roughness Sublayer) располагается над UCL: здесь поток всё ещё испытывает влияние отдельных высоких зданий, но постепенно адаптируется к вышележащему атмосферному течению и переходит в логарифмический приземный слой, который, в свою очередь, сменяется выше внешней частью пограничного слоя [Oke, 1988]. Натурные наблюдения над Москвой демонстрируют определяющую роль термической стратификации и сдвиговой неустойчивости пограничного слоя в формировании приземных концентраций аэрозолей: турбулентное вовлечение при сдвиге ветра вблизи верхней границы ночной инверсии может как резко снижать концентрации PM_{10} при локальных городских источниках, так и, напротив, многократно их повышать за счёт опускания загрязнённой воздушной массы сверху при адвекции аэрозоля [Кузнецова, 2012]. Важность учёта этих метеорологических факторов и динамики ГПС как естественного модулятора качества воздуха подтверждается и современными долгосрочными наблюдениями за составом субмикронного аэрозоля (в частности, чёрного углерода) в Москве: краткосрочные метеорологические флуктуации и изменения высоты ГПС способны существенно влиять на приземные концентрации, даже на фоне радикальных изменений в интенсивности городских антропогенных источников [Popovicheva et al., 2024].

Внутри слоя городского полога развиваются характерные, хорошо изученные явления. В зависимости от плотности застройки выделяют три основных режима течения [Britter, Hanna, 2003]. При редкой застройке каждое здание имеет свой собственный турбулентный след (режим изолированной шероховатости). По мере увеличения плотности турбулентные следы от соседних препятствий начинают взаимодействовать (режим интерференции). Наконец, при плотной застройке упорядоченный воздушный поток может «перескакивать» с крыши на крышу, а внутри уличных каньонов формируются относительно изолированные вихревые структуры – это режим скользящего течения, *skimming flow* [Oke, 1988].

Влияние геометрии застройки на дисперсию примесей.

Наиболее изученной идеализированной структурой городской поверхности является уличный каньон. При ветре, направленном перпендикулярно его оси, внутри формируется основной каньонный вихрь, вращение которого направлено так, что у наветренной стены поток движется вниз, а у подветренной – вверх. Эта циркуляция может эффективно «запирать» загрязняющие вещества, выбрасываемые на уровне улицы, приводя к высоким концентрациям у подветренной стены [Глазунов, 2018]. Так, в классических экспериментах в аэродинамической трубе было показано, что концентрации загрязнителей у наветренной стены

могут быть в 10 раз выше, чем у подветренной [Kastner-Klein, Plate, 1999]. Однако натурные эксперименты показывают, что эта простая картина может нарушаться в реальных условиях. Например, если источник выбросов смещён к одной из сторон каньона, то максимальные концентрации могут наблюдаться именно у этой, ближайшей к источнику, стены, вне зависимости от общей вихревой структуры потока [Karra et al., 2011]. Помимо основного вихря, в углах каньона могут формироваться вторичные, более слабые вихри. При ветре, направленном вдоль оси каньона, возникает «эффект канала» (channeling), приводящий к значительному усилению скорости ветра и, как следствие, к более эффективному продольному выносу примеси. Здания выступают в роли массивных препятствий (или боковой шероховатости), которые генерируют интенсивную механическую турбулентность, особенно вблизи их наветренных углов и на сдвиговом слое над уровнем крыш [Droste, 2018]. Все эти процессы создают крайне неоднородное трехмерное поле ветра и турбулентности, детальное описание которого является ключевым для корректного моделирования траекторий аэрозольных частиц.

Для изучения этих сложных процессов в контролируемых условиях исследователи долгое время использовали области с идеализированной геометрической структурой. Развитие этого подхода можно условно разделить на несколько исторических этапов.

Этап 1. Идеализированный уличный каньон. Ранние работы, как экспериментальные (в аэродинамических трубах), так и численные, фокусировались на одиночном, бесконечно длинном в поперечном направлении уличным каньоне [Oke, 1988]. Эта простейшая модель позволила выявить фундаментальные зависимости режимов течения и концентраций от аспектного отношения (соотношения высоты зданий к ширине улицы). Было показано, что с ростом аспектного отношения каньонный вихрь становится более выраженным и стабильным, а вентиляция каньона ухудшается. Эти ранние исследования заложили основу понимания процессов вентиляции в городской застройке. Количественные зависимости концентраций от аспектного отношения подтверждаются и в современных RANS-расчётах [Старченко и др., 2022]: при варьировании аспектного отношения каньона от 0.25 до 4.0 и слабом набегающем ветре средняя концентрация автотранспортных выбросов в зоне дыхания возрастает примерно на порядок, в глубоких каньонах формируется характерная двухвихревая структура, а дополнительный нагрев одного из фасадов более чем удваивает максимальные приземные концентрации за счёт генерации вторичных застойных вихрей у поверхности дороги.

Этап 2. Регулярные массивы зданий. Следующим шагом стало усложнение геометрии в виде регулярных массивов одинаковых зданий (чаще всего кубов или параллелепипедов),

расположенных в шахматном или коридорном порядке. Этот подход позволил исследовать влияние таких интегральных параметров, как плотность застройки, фронтальная площадь и ориентация зданий относительно направления ветра. Моделирование потока над такими массивами показало, что плотность застройки определяет основной режим течения (например, скользящее течение при высокой плотности), а ориентация «улиц» относительно ветра может кардинально менять пути переноса примеси [Britter, Hanna, 2003]. Прямое численное моделирование (DNS) дисперсии от точечного источника в регулярном массиве кубических зданий выявило набор специфических механизмов переноса: канализирование (channelling) примеси вдоль улиц, топологическую дисперсию при обтекании препятствий и перекокс (skewing) шлейфа по высоте при изменении угла набегающего ветра. Показано, что аэродинамические следы зданий действуют как «вторичные источники», высвобождая захваченный скаляр с задержкой во времени [Branford et al., 2011]. Валидация численных моделей для таких конфигураций часто проводилась по данным натуральных экспериментов, в ходе которых в регулярном массиве препятствий выпускался трассер [Milliez, Carissimo, 2007]. Конфигурации, рассмотренные в Главе 3 данной диссертации как «регулярные», являются прямым «наследником» этого подхода.

Этап 3. Переход к гетерогенным конфигурациям. Тем не менее, использование регулярных идеализированных массивов для оценки вентиляционного потенциала реальных городов имеет фундаментальные ограничения. Исследования последних лет демонстрируют, что реалистичная 3D-морфология города формирует принципиально иные аэродинамические паттерны, которые не аппроксимируются простыми 2D-зависимостями [Li et al., 2021]. Как показано на базе масштабной базы данных LES-экспериментов UrbanTALES (538 конфигураций), классические параметры (плотность застройки и индекс фронтальной площади) демонстрируют большой разброс и плохо описывают турбулентные потоки в гетерогенной застройке, уступая более сложным метрикам, таким как связность улиц [Nazarian et al., 2025]. Аналогичные выводы получены при LES-моделировании аэродинамики 11 процедурно сгенерированных рандомизированных морфологий на основе ЛКЗ: даже при фиксированных значениях плотности и фронтальной площади, вариативность высот зданий кардинально меняет вертикальный профиль аэродинамического сопротивления, а классические экспоненциальные параметризации скорости ветра внутри городского полога оказываются неприменимы [Nagel et al., 2023]. Эта эволюция в понимании проблемы отражена не только в модельных, но и в экспериментальных исследованиях, которые также посвящаются

детальным воспроизведениям реальных городских кварталов в аэродинамических трубах [Kastner-Klein et al., 2004].

Важнейшим фактором отличия реалистичной застройки от регулярной является вариативность высот зданий. В плотных массивах одинаковой высоты загрязнители удаляются преимущественно за счет горизонтального среднего потока вдоль улиц [Hang et al., 2012]. Введение даже умеренной гетерогенности по высоте перераспределяет кинетическую энергию, разрушая режим скользящего течения (*skimming flow*) и интенсифицируя вертикальный турбулентный вынос в слой над крышами [Hang et al., 2012; Shui et al., 2025]. Результаты вихреразрешающего моделирования демонстрируют, что в реалистичной застройке именно вертикальный турбулентный массоперенос обеспечивает более 70% всего выноса аэрозолей, доминируя над устойчивыми восходящими потоками [Zhang et al., 2021; Du et al., 2024]. Помимо вариативности высот, существенную роль играет ориентация массива зданий относительно направления набегающего ветра. Моделирование показывает, что изменение угла атаки фундаментально перестраивает топологию потока: от режима скользящего течения при обдуве вдоль улиц к режиму интенсивной интерференции аэродинамических следов при косом обдуве [Claus et al., 2012].

Для количественного разделения регулярных, рандомизированных и реалистичных конфигураций в современных исследованиях применяются математические метрики сложности. Реальные города обладают сложной структурой, в том числе фрактальной, и не могут быть описаны только средними значениями плотности [Chen, 2019]. Для оценки степени кластеризации зданий и дисперсии пустот в застройке успешно применяется математический аппарат лакунарности (*lacunarity*, наличие пустых пространств – лакун), позволяющий отличить жёстко структурированный массив от хаотичного при одинаковой средней плотности [Plotnick et al., 1996]. Кроме того, для оценки пространственной хаотичности застройки используются показатели энтропии ориентации улиц [Boeing, 2019]. Применение таких метрик показывает, что даже при одинаковой базовой плотности застройки именно ее пространственная компоновка – степень регулярности зданий, хаотичность их расположения и перепады высот – кардинально меняет режимы обтекания и формирует локальные зоны застоя аэрозолей [Chen, 2019; Li et al., 2021]. Поскольку упрощенные макропараметры не способны отразить эту нелинейную аэродинамику, возникает необходимость в прямом микромасштабном моделировании (например, методами LES). При этом для объективной оценки вентиляционного потенциала принципиально важно не ограничиваться классическими регулярными массивами, а сопоставлять их с реалистичными и рандомизированными

конфигурациями, явно воспроизводя различные типы трёхмерной городской геометрии [Li et al., 2021].

Концепция локальных климатических зон.

Универсальным инструментом в городской морфологии, позволяющим преодолеть разрыв между идеализированными моделями и сложным реальным ландшафтом, стала классификация локальных климатических зон (ЛКЗ) [Stewart, Oke, 2012]. Эта система представляет собой стандартизованную и объективную основу для описания и сравнения городской и сельской местности. Классификация включает 17 стандартных классов подстилающей поверхности: 10 урбанизированных (от плотной высотной застройки до разреженной малоэтажной) и 7 природных (рис. 1.5).

Типы локальных климатических зон застройки (built-up)



Типы локальных климатических зон земельного покрова (land cover)



Рисунок 1.5. Типы локальных климатических зон [Stewart, Oke, 2012; Самсонов и Тригуб, 2018].

Каждый класс ЛКЗ объективно определяется количественными диапазонами физических параметров городского полога (Urban Canopy Parameters, UCP): плотностью застройки, высотой зданий, фактором видимости неба, отношением высоты к ширине каньона (отношение аспекта) и долей проницаемых поверхностей [Stewart, Oke, 2012]. Для автоматизации процессов сбора информации о городской морфологии и картирования ЛКЗ в глобальном масштабе была создана инфраструктура WUDAPT [Ching et al., 2018], опирающаяся на алгоритмы машинного обучения, спутниковые данные и платформы для генерации итоговых пространственных полей, как LCZ Generator [Demuzere et al., 2021]. Результатом развития этого направления стало появление глобальной карты ЛКЗ с пространственным разрешением 100 метров, что позволяет детально описывать геометрические параметры ячеек городов в региональных и мезомасштабных моделях [Demuzere et al., 2022]. Изначально концепция ЛКЗ разрабатывалась преимущественно для стандартизации исследований городского острова тепла [Varentsov et al., 2020], однако в последние годы произошел сдвиг парадигмы, и ЛКЗ стали перспективным пространственным каркасом для моделирования городской вентиляции и дисперсии аэрозолей [Gál et al., 2025].

Многочисленные исследования демонстрируют, что метод ЛКЗ превосходит традиционные системы классификации землепользования (например, LUCC) в интерпретации пространственного распределения частиц $PM_{2.5}$ и PM_{10} , так как именно 3D-атрибуты геометрии в большой степени контролируют микроклимат и аэродинамику в городе [Jiang et al., 2023]. Натурные и модельные эксперименты подтверждают зависимость вентиляционного потенциала территории от геометрических параметров, определяющих класс ЛКЗ [Zhao et al., 2020]. Компактная (плотная) застройка (ЛКЗ 1, 2, 3) значительно ослабляет дисперсию: высокое аэродинамическое сопротивление блокирует потоки ветра внутри полога, формируя застойные "горячие точки" накопления аэрозолей [Shi et al., 2019; Wu et al., 2024]. Например, в зимний период в плотной среднеэтажной застройке (ЛКЗ 2) фиксируют систематически более высокие концентрации $PM_{2.5}$ по сравнению с открытой застройкой той же этажности (ЛКЗ 5), что отражается как на уличных концентрациях, так и на качестве воздуха внутри прилегающих зданий [Nourani et al., 2025]. Динамика трансформации городской ткани также подтверждает эту закономерность: анализ многолетних спутниковых данных для Тегерана показал, что конверсия плотной среднеэтажной застройки (ЛКЗ 2) в открытую высотную (ЛКЗ

4) сопровождалась заметным снижением концентраций PM_{10} в соответствующих районах [Maleki et al., 2023].

В свою очередь, открытая застройка (ЛКЗ 4, 5, 6) обеспечивает более высокие скорости ветра и лучший воздухообмен, способствуя эффективному рассеиванию загрязняющих веществ [Zhao et al., 2020; Hidalgo-García, Rezapouraghdam, 2026]. Модели машинного обучения показывают, что ЛКЗ могут успешно применяться в роли предиктора пространственного распределения $PM_{2.5}$, например наличие зон открытой высотной застройки (ЛКЗ 4) обходит по значимости даже влияние интенсивности локального трафика [Amouei, 2023]. При этом влияние геометрии на перенос примесей нелинейно: влияние городской морфологии может быть специфично для каждого загрязнителя и для каждой конкретной ЛКЗ [Xu et al., 2026]. Более того, отдельные исследования показывают, что помимо базовой классификации, критическую роль играют внутренние геометрические структуры – то есть то, как именно сгруппированы здания внутри конкретной зоны [Lin et al., 2024; Yang et al., 2026]. Например, степень скученности и пространственной непрерывности застройки, фрагментированность квартала напрямую определяют аэродинамическую проницаемость пространства и, следовательно, потенциал для его вентиляции [Lin et al., 2024]. Высокая скученность зданий формирует физические барьеры, которые блокируют потоки ветра и создают устойчивые зоны застоя аэрозолей [Yang et al., 2026]. Напротив, более фрагментированная структура с частыми разрывами разрушает эти «ловушки», способствуя локальной вентиляции [Lin et al., 2024]. Такие геометрические барьеры управляют пространственным распределением и аккумуляцией $PM_{2.5}$, причём значимость их влияния сохраняется на протяжении всего года независимо от сезонных изменений метеорологического фона [Lin et al., 2024; Yang et al., 2026].

Таким образом, классификация ЛКЗ не только популярна и эффективна в задачах, связанных с тепловым балансом и температурным режимом в городе, но и обладает высоким потенциалом для применения в качестве предиктора распространения и накопления примесей в городском воздухе. Однако её применение имеет ряд ограничений [Amouei, 2023; Gál et al., 2025]. Каждый класс ЛКЗ задает лишь допустимые спектры значений для параметров городского полога (например, диапазоны плотности и высоты), внутри которых фактическая пространственная структура может варьироваться кардинально. Как было отмечено ранее, даже при идентичной базовой плотности застройки, изменения в вариативности высот [Hang et al., 2012; Sützl et al., 2021], смещении архитектурных блоков друг относительно друга [Sushanth et al., 2025], а также степени их пространственной агрегации [Lin et al., 2024]

фундаментально перестраивают локальную аэродинамику и вентиляцию. Следовательно, принадлежность территории к определенному классу ЛКЗ сама по себе не способна исчерпывающе описать микромасштабные поля течений и локальные застои примесей у фасадов.

Привлечение точных географических данных на примере Москвы показывает, что реальная гетерогенная геометрия застройки в городах имеет широкий спектр значений морфометрических параметров, иногда даже выходящий за границы стандартных табличных значений ЛКЗ [Самсонов и Тригуб, 2018; Varentsov et al., 2020]. Для получения достоверной картины дисперсии загрязняющих веществ в условиях города требуются уточнения, какие масштабы и процессы контролируются ЛКЗ, а какие – локальными структурами застройки [Gál et al., 2025]. Перспективным инструментом для исследования данного направления является микромасштабное вихререзшающее моделирование. Как будет показано в Главе 3, оно позволяет детально исследовать, как перенос примесей реагирует на различные варианты пространственной компоновки зданий – от строгих регулярных матриц до рандомизированных и реалистичных структур – в пределах значений параметров, заданных локальными климатическими зонами.

Сухое осаждение аэрозолей в городской среде.

Помимо переноса течением и турбулентной диффузии, ключевым процессом, определяющим время жизни аэрозолей в атмосфере и формирующим их итоговые концентрации, является сухое осаждение – удаление частиц из воздуха при их контакте с поверхностями в отсутствие осадков [Mohan, 2016; Sokhi et al., 2022]. В городской среде, с её огромной площадью вертикальных и горизонтальных поверхностей, этот процесс играет особенно важную роль в самоочищении атмосферы. Основными физическими процессами, контролирующими удаление частиц, являются броуновская и турбулентная диффузия, зацепление, инерционное столкновение и гравитационное оседание [Johnson, 2023]. Интенсивность каждого механизма и сухого осаждения в целом зависит от размера (аэродинамического диаметра) и массы частиц, характеристик потока и свойств поверхности [Seinfeld, Pandis, 2006]. Для самых мелких, субмикронных частиц (менее 0.1 мкм) доминирует диффузия в вязком подслое, а для крупных (более 10 мкм) основной вклад вносят гравитация и инерционные столкновения или импакция [Petroff, Zhang, 2010]. В промежуточном диапазоне (0.1–1 мкм), к которому относится большая часть массы PM_{2.5}, частицы имеют минимальную скорость осаждения (так называемая V-образная кривая для зависимости скорости осаждения от диаметра частиц), поскольку броуновская диффузия для них уже слаба,

а инерция ещё недостаточна для столкновения с преградами [Lai, Nazaroff, 2000; Giardina et al., 2019]. Ключевую роль для таких частиц играет турбулентный перенос через вязкий подслой и для самых тяжёлых частиц инерционные столкновения при отклонениях от линий тока [Liu, Ahmadi, 2006; Petroff, Zhang, 2010].

В эйлеровых химико-транспортных моделях комплекс этих процессов обычно параметризуется через единую скорость сухого осаждения (V_d). Она определяется как отношение потока вещества на поверхность (F) к его концентрации в воздухе на некотором референсном расстоянии от поверхности (C): $V_d = -F/C$. Значение V_d можно представить как величину, обратную сумме аэродинамического сопротивления (R_a , перенос через турбулентный слой), сопротивления вязкого подслоя (R_b) и поверхностного сопротивления (R_c). Стоит отметить, что обоснованность концепции скорости осаждения недавно была поставлена под сомнение для атмосферных аэрозолей из-за сложного взаимодействия между турбулентным переносом и химическими превращениями [Kouznetsov et al., 2026], но сомнения касаются, в первую очередь, химически активных аэрозолей.

Более того, глобальные схемы часто параметризуют городскую застройку как шероховатую горизонтальную плоскость, игнорируя осаждение на вертикальные стены [Petroff, Zhang, 2010; Pleim et al., 2022]. Этот процесс проявляется в видимом загрязнении фасадов (потемнение стен зданий, т.н. «soiling») и, что не менее важно, является значимым стоком аэрозольной массы из городского воздуха. Игнорирование площади фасадов приводит к сильному занижению как общей площади поверхностей, так и аэродинамического сопротивления городского полога, что может приводить к существенным ошибкам в расчёте локального баланса массы аэрозолей [Cherin et al., 2015; Cheng, Fu, 2025]. В отличие от природных ландшафтов, город обладает гигантской площадью вертикальных поверхностей, которые выступают дополнительным физическим фильтром [Thouren et al., 2017]. Расчёты с усовершенствованными схемами осаждения показывают, что для мелкодисперсных фракций потоки сухого осаждения на вертикальные стены зданий могут быть сопоставимы с потоками на горизонтальные крыши (рис. 1.6), поскольку вертикальное гравитационное оседание для таких частиц пренебрежимо мало [Thouren et al., 2017].

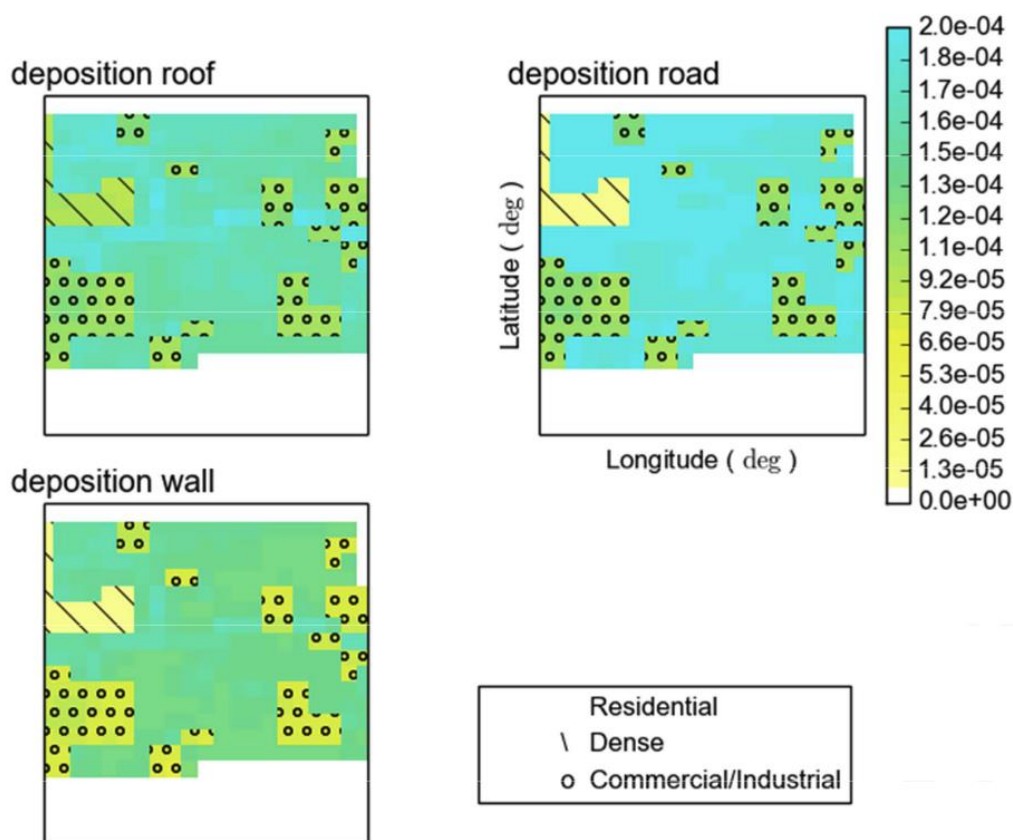


Рисунок 1.6. Средние потоки сухого осаждения аэрозолей бензо[а]пирена на разные поверхности, в том числе отдельно стены, на территории Парижа в марте-июне 2014 года по данным численного моделирования [Thourot, 2017].

Осаждение на вертикальные стены управляется не гравитацией, а направленной турбулентной диффузией (турбофорезом) из активного ядра течения в менее турбулентные пристеночные области [Johansen, 1991; Zhang, Ahmadi, 2000; Guha, 2008]. Применение вихререзающих моделей (например, модели PALM с эйлеровым модулем переноса SALSА) демонстрирует, что этот процесс сухого осаждения способен снижать общую концентрацию частиц в уличных каньонах более чем на 20% [Kurppa et al., 2019]. В модуле SALSА осаждение на стены реализовано через задание поверхностного потока частиц – классический способ для эйлеровых моделей [Zhang, 2001; Kurppa et al., 2019]:

$$F = -V_d n_{t-\Delta t}, \quad (1.5)$$

где F – поток частиц в направлении поверхности, V_d – скорость сухого осаждения, зависящая от аэродинамического и поверхностного сопротивлений, размера и массы частицы, а также от эффективности прилипания R , равной доле частиц, прилипающих к поверхности (Zhang, 2001). Обычно для расчёта R используется классическая параметризация на основе числа Стокса (Slinn, 1982):

$$R = \exp(-St^{1/2}) = \exp\left(-\left(\frac{V_g u_*}{gA}\right)^{1/2}\right), \quad (1.6)$$

где V_g – скорость гравитационного оседания, u_* – скорость трения, g – гравитационное ускорение, A – характерный масштаб поверхности, для зданий это масштаб их элементов шероховатости, который обычно принимается порядка 0.01~0.1 м (Zhang, 2001). При таком подходе можно примерно оценить R для разных размеров частиц: для 0.1 мкм эффективность прилипания составит 99.9%, для 1 мкм – 99.2%, для 10 мкм – 92.4%, для 100 мкм – 45.6%. Для мелкодисперсных частиц (<10 мкм) значения близки к единице, что означает практически полное прилипание. Однако эта параметризация разработана для природных поверхностей и гладких пластин; её применимость к реальным шероховатым фасадам с отрывными течениями остаётся предметом дискуссии (Maro et al., 2014; Altmeyden et al., 2022). В лагранжевых моделях взаимодействие частиц со стенами описывается принципиально иначе – через граничные условия отскока или прилипания для каждой частицы, когда результат может зависеть от кинетической энергии удара, угла подлёта и микрошероховатости (Brach и Dunn, 1992; Almohammed и Breuer, 2016). Таким образом, выбор подхода к описанию взаимодействия частиц с поверхностью может вносить существенную неопределённость в оценку роли фасадного осаждения.

Как уже упоминалось, скорость захвата частиц стеной зависит от шероховатости её поверхности. Экспериментальные данные и численное моделирование подтверждают, что интенсивность осаждения на шероховатые фасады (например, штукатурку) может быть на порядок выше, чем на гладкое стекло, а доля глобального осаждения на стены внутри замкнутых объемов достигает 30-33% от общего стока частиц [Abadie et al., 2001; Maro et al., 2014; Hong et al., 2020]. Натурные эксперименты с выпуском флуоресцентного трассера в реальном уличном каньоне подтвердили, что скорость осаждения существенно различается для разных строительных материалов (стекло, мрамор, керамика, природный камень) даже при идентичных метеорологических условиях, что обусловлено различиями в микрошероховатости и тепловых свойствах поверхностей [Ielro et al., 2020]. Локальное пространственное распределение осаждённой примеси при этом оказывается крайне неоднородным: в зонах сильной турбулентности у ребер зданий и в отрывных течениях формируются «горячие точки» (hotspots), где скорость осаждения многократно превосходит средние значения по фасаду [Pesava et al., 1999; Jonsson et al., 2008].

Для корректного воспроизведения этих микрофизических особенностей в лагранжевых моделях требуется детальное описание взаимодействия частиц с фасадами [Talebmoustaph et al., 2024]. Простые граничные условия в формате «идеальной ловушки» (trap), предполагающие безусловное поглощение частицы при касании поверхности, часто приводят к сильному завышению осаждения крупных частиц [Sun et al., 2011; Chahardoli et al., 2022]. В более комплексных подходах вероятность адгезии (прилипания) или упругого отскока рассчитывается через баланс кинетической энергии удара, угла подлета, сил Ван-дер-Ваальса и свойств микрошероховатости поверхности, что позволяет напрямую моделировать как потерю энергии, так и необратимое поглощение [Wiman, Agren, 1985; Brach, Dunn, 1992; Almohammed, Breuer, 2016; Altmeppen et al., 2022]. Особую роль в этом сложном балансе стоков играет городская растительность. С одной стороны, деревья действуют как дополнительный фильтр за счет осаждения аэрозолей на листья [Janhäll, 2015; Viesso et al., 2018]. С другой стороны, кроны выступают аэродинамическим барьером, блокирующим вентиляцию уличных каньонов [Хуе, Ли, 2017]. Моделирование показывает, что для мелких фракций этот негативный эффект «запираания» потока может превосходить очищающий эффект осаждения, в связи с чем в плотной застройке вертикальное озеленение фасадов (зеленые стены) признается более эффективным и безопасным инструментом улучшения качества воздуха, чем высадка деревьев [Xing, Brimblecombe, 2019; Viesso et al., 2021].

Таким образом, несмотря на признанную физическую значимость процесса сухого осаждения на вертикальные поверхности, он остаётся одним из наименее изученных аспектов городской микрометеорологии [Farmer et al., 2021; Sokhi et al., 2022]. Прямые инструментальные измерения потоков аэрозолей на реальные стены крайне редки и методологически сложны: контактные микросенсоры физически искажают пристеночный пограничный слой, а натурные эксперименты с трассерами трудно масштабировать на различные архитектурные формы [Maro et al., 2014; Costa et al., 2022]. В то же время традиционные макромасштабные и оперативные уличные модели не способны явно разрешить сложную аэродинамику у фасадов, опираясь на упрощенные одномерные параметризации, что может приводить к ошибкам в оценке стоков [Cherin et al., 2015; Kouznetsov et al., 2026]. Следовательно, в современной науке сохраняется пробел в понимании того, какие эффекты на концентрации примесей оказывает фасадное осаждение и как связан этот процесс с характеристиками городской застройки. Это открывает широкое пространство для исследований и обосновывает высокую востребованность проведения систематических численных экспериментов на базе вихререзающих LES-моделей [Cheng, Fu, 2025]. Такой

подход позволяет количественно оценить, насколько мощным стоком выступают фасады зданий и какое влияние оказывает детальная геометрия на итоговые поля концентраций аэрозолей в условиях городского микроклимата [Sokhi et al., 2022; Cheng, Fu, 2025]. Как будет количественно показано в Главе 4 настоящей диссертации, адекватный учёт осаждения на вертикальные поверхности является критически важным для корректного моделирования полей концентрации в городе, и неопределённость в параметризации этого процесса может превосходить неопределенность, связанную с разбросом размеров и масс самих частиц.

1.5 Методология верификации и валидации моделей переноса

Корректность результатов численного моделирования напрямую зависят от качества верификации используемой модели. В области моделирования переноса примесей в атмосфере сложился общепринятый комплексный подход, включающий сравнение с несколькими типами эталонных данных.

Первым и обязательным шагом является верификация численной модели, в которой дифференциальные уравнения дискретизированы на сетках конечного размера, на аналитических решениях, которые могут быть получены для сильно идеализированных условий. Например, существуют аналитические решения для вертикального профиля концентрации пассивной примеси [Wamser, Lykossov, 1995; Семёнов, 2020]. Для более сложных случаев, включающих гравитационное оседание частиц или их обратное влияние на стратификацию, также существуют аналитические или полуаналитические решения [Wamser, Lykossov, 1995]. Сравнение с такими решениями позволяет проверить корректность реализации базовых физических законов (например, гравитационного оседания) и численных схем модели в простейших, полностью контролируемых условиях.

Следующим шагом является валидация модели по данным лабораторных экспериментов в аэродинамических трубах. Такие эксперименты позволяют изучать поток и перенос примеси вокруг моделей зданий или их массивов в контролируемых и воспроизводимых условиях [Kastner-Klein, Plate, 1999; Lim et al., 2022]. Основным преимуществом такого подхода является возможность детального измерения полей скорости и концентрации, однако существуют и ограничения, связанные с невозможностью точного воспроизведения всех масштабов атмосферной турбулентности и выполнением критериев подобия (например, по числу Рейнольдса, которое в лабораторных условиях, как правило, сильно меньше характерных значений в геофизических пограничных слоях).

Наиболее убедительной является валидация по данным натурных полевых экспериментов, поскольку они предоставляют информацию о реальных процессах в атмосфере. В ходе экспериментальных кампаний в городской среде выпускается инертный газ-трассер, а его концентрация измеряется в множестве точек подветренной области. Эти данные являются «золотым стандартом» для проверки моделей дисперсии [Milliez, Carissimo, 2007]. Похожий подход с выпуском искусственного аэрозольного трассера применяется и для прямого измерения скорости осаждения на фасады зданий [Maro et al., 2014]. Однако такие эксперименты чрезвычайно дороги, трудоёмки и редки. Кроме того, сложность и изменчивость метеорологических условий, имевших место во время эксперимента, создают дополнительные трудности для корректного обеспечения модели начальными, граничными условиями и внешними параметрами. Данные регулярного мониторинга, в свою очередь, слишком разрежены в пространстве для полноценной валидации моделей на микромасштабе. В последнее время этот пробел начинает восполняться за счёт инновационных подходов, например, с использованием данных с мобильных датчиков, установленных на транспортных средствах, что позволяет получать карты распределения концентраций с высоким пространственным разрешением для верификации моделей [Zhang et al., 2021; Du et al., 2024].

Отдельным направлением, тесно связанным с задачей валидации при неполных и разнородных данных, является оценка качества и объединение разреженных измерений. Алгоритмы на основе операторов чувствительности и ансамблей сопряжённых задач [Penenko et al., 2021] позволяют объединять гетерогенные измерения в единое операторное уравнение и восстанавливать положение и мощность источников загрязнения – что особенно востребовано в микромасштабных задачах, где инвентаризация выбросов и локальная ветровая обстановка известны лишь приближённо.

В последние десятилетия в качестве мощного инструмента для верификации моделей все чаще используется вихреразрешающее моделирование (LES). LES-модели, в которых явно разрешается большая часть энергонесущего спектра турбулентности, способны генерировать полные, четырехмерные, физически согласованные поля метеовеличин и концентраций. Такие данные можно рассматривать как результаты «виртуального натурального эксперимента». LES-моделирование позволяет преодолеть ограничения натурных экспериментов: оно предоставляет информацию о гидродинамических полях и концентрациях примесей в каждой точке пространства и времени и обеспечивает полный контроль над граничными и начальными условиями. Современные LES модели успешно применяются для моделирования переноса

частиц как в городской среде, так и в других сложных конфигурациях, например, в салонах самолетов [Wang et al., 2011; Zhang et al., 2021].

Поэтому наиболее информативным и экономным по задействованным ресурсам подходом является кросс-верификация, когда более простая, например, RANS или стохастическая лагранжева модель проверяется по результатам расчетов высокодетальной LES-модели, которая, в свою очередь, была ранее валидирована по лабораторным или натурным данным [Grylls, 2019]. Именно такой подход используется в Главе 2 настоящей работы для детальной проверки и взаимного сопоставления результатов различных стохастических параметризаций.

В заключение, совокупность всех перечисленных методов – от теоретических аналитических решений до комплексных численных и натуральных экспериментов – формирует современную методологическую базу для разработки и проверки моделей переноса аэрозолей, обеспечивая их надежность и применимость для решения научных и прикладных задач.

1.6 Заключение к главе 1

Проведённый анализ литературы демонстрирует значительную эволюцию в подходах к моделированию переноса и осаждения аэрозолей в городской среде. Исследования прошли путь от применения макромасштабных эйлеровых моделей и усредненных моделей сопротивлений, разработанных для однородных ландшафтов, до микромасштабного вихререшающего моделирования (LES) и многокомпонентных параметрических схем городского полога [Cherin et al., 2015; Sokhi et al., 2022]. Авторы обзорных работ подчеркивают, что глобальные и региональные модели не способны уловить локальные градиенты загрязнений, и для адекватного описания качества воздуха необходимо явно учитывать сложную трехмерную структуру застройки [Monks et al., 2009; Li et al., 2021].

Экспериментальные и численные исследования демонстрируют, что концентрация и выведение, в т.ч. путём осаждения, загрязняющих веществ крайне чувствительны к локальным факторам: вариативности высот, ориентации зданий и шероховатости поверхностей [Kastner-Klein, Plate, 1999; Karra et al., 2011; Maro et al., 2014]. Показано, что идеализированные регулярные массивы зданий формируют аэродинамические режимы, значительно отличающиеся от поведения потоков в реалистичной гетерогенной застройке [Hang et al., 2012; Sützl et al., 2021]. Использование концепции локальных климатических зон (ЛКЗ) позволило стандартизировать городскую морфологию и выявить влияние типов застройки на качество воздуха [Stewart, Oke, 2012; Jiang et al., 2023]. Однако принадлежность к определенному классу

ЛКЗ сама по себе не описывает всего многообразия микромасштабной аэродинамики, так как внутренняя агрегация и пространственная структура зданий формируют уникальные зоны застоя или вентиляции [Lin et al., 2024; Nazarian et al., 2025].

Отдельным вызовом остается оценка сухого осаждения на вертикальные фасады зданий. Городская растительность и стены действуют как эффективные стоки для аэрозолей, но одновременно выступают аэродинамическими барьерами [Хуе, Ли, 2017; Viesso et al., 2021]. Если для растительности этот двойственный эффект активно изучается, то фасады зданий в большинстве моделей по-прежнему игнорируются или параметризуются крайне упрощенно, что ведет к сильным искажениям баланса примеси [Kouznetsov et al., 2026; Cheng, Fu, 2025].

Несмотря на значительный прогресс, достигнутый благодаря развитию микромасштабных численных моделей с эйлеровым и лагранжевым переносом примесей [Kurppa et al., 2019; Maronga et al., 2020], ряд фундаментальных вопросов остается открытым.

Во-первых, сохраняется существенная неопределенность в том, насколько классификация ЛКЗ применима в качестве предиктора для переноса и накопления примесей, и в том, какие параметры переноса и накопления наиболее чувствительны к типу ЛКЗ, а какие определяются внутренней структурой застройки – её регулярностью, хаотичностью расположения зданий и вариативностью высот.

Во-вторых, хотя важность сухого осаждения на вертикальные поверхности была доказана экспериментально, его количественный вклад в общую изменчивость полей концентрации внутри городской застройки различных конфигураций до сих пор не был системно оценён. В научном сообществе отсутствует консенсус относительно методов параметризации этого процесса: граничные условия варьируются от полного поглощения до сложных стохастических моделей отскока, а значительная часть моделей качества воздуха вовсе не учитывает осаждение на фасады, что затрудняет оценку его реальной роли в формировании городских полей концентрации.

Таким образом, проведенный анализ литературы не только очерчивает современное состояние науки, но и четко выявляет существующие пробелы в знаниях. Это обосновывает проведение систематических численных экспериментов на базе микромасштабного вихререшающего моделирования для детального исследования поведения аэрозолей при различных вариантах конфигурации зданий. В последующих главах будет представлен разработанный на основе лагранжева подхода модельный инструментарий, который будет применен для системного изучения переноса и осаждения аэрозолей в различных конфигурациях застройки с целью ответа на поставленные выше фундаментальные вопросы.

Глава 2. Модель лагранжева переноса частиц

2.1 Введение: концепция модели

Моделирование переноса и осаждения аэрозольных частиц в атмосферном пограничном слое является ключевым инструментом для решения широкого спектра научных и прикладных задач, от оценки качества воздуха в городах и рисков для здоровья населения до исследования влияния аэрозолей на климатические процессы. Особую сложность представляют урбанизированные территории, где неоднородное поле течения, обусловленное городской застройкой, требует использования моделей с высоким пространственным разрешением и детальным учетом физических процессов. Данная глава посвящена описанию разработанного в рамках настоящей диссертации численного инструмента – модели лагранжева переноса частиц, которая служит основой для получения новых научных результатов, представленных в последующих главах.

Целью создания данной модели являлась разработка гибкого и насыщенного физическими процессами модельного комплекса, способного воспроизводить траектории и распределение частиц в сложных атмосферных условиях. Выбор лагранжева подхода в качестве основы был продиктован его фундаментальными преимуществами: возможностью явного учета сил, действующих на каждую отдельную частицу, и высокой информативностью, поскольку знание траекторий позволяет вычислять любые статистические характеристики ансамбля частиц, включая поля концентраций. Ключевыми принципами, заложенными при разработке модели, стали:

- **Детальное моделирование физических процессов.** Модель предоставляет широкий набор инструментов для подробного описания движения частиц: реализованы различные параметризации для учета влияния турбулентности и сопротивления среды, что позволяет корректно моделировать движение как мелких пассивных, так и крупных инерционных частиц. Лагранжева природа модели позволяет рассчитывать вклад отдельных сил в итоговую траекторию движения каждой частицы.
- **Модульность и адаптивность.** Программная реализация построена по модульному принципу, что позволяет гибко настраивать модель под конкретные условия численного эксперимента. Пользователь может отключать учет физических процессов, несущественных для рассматриваемой задачи (например, распад частиц при моделировании пыли), или выбирать между более сложными и точными и более простыми и вычислительно эффективными алгоритмами для отдельных блоков модели, соблюдая баланс между точностью и скоростью расчетов.

- **Акцент на городских задачах.** Особое внимание при разработке уделялось возможностям моделирования в условиях сложной городской подстилающей поверхности. Реализован механизм явного взаимодействия частиц со зданиями и другими поверхностями (осаждение и упругий отскок), причём осаждение может отслеживаться отдельно для горизонтальных (крыши, почва) и вертикальных (стены) поверхностей. Для получения статистически значимых полей концентрации в неоднородной городской среде модель адаптирована для работы с большим числом частиц и разными их типами.

Создание, верификация и развитие данного программного кода является неотъемлемой частью настоящей диссертационной работы, поскольку именно он позволил получить основные научные результаты. Данная глава служит для подробного описания методологии и инструментария исследования. В ней последовательно рассматриваются физико-математические основы модели, её программная реализация и результаты верификации, а также описываются особенности её интеграции в качестве вычислительного модуля в LES-модель НИВЦ МГУ и ИВМ РАН.

2.2 Физико-математическая модель

В лагранжевом подходе движение отдельной частицы определяется уравнением (1.2), где в качестве заданного параметра или неизвестной величины выступает ее скорость. В наиболее простом случае скорость частицы может быть принята за константу. Для учета более комплексного характера движения, в том числе влияния свойств самой частицы, характеристик окружающей среды, а также различных сил и взаимодействий, вводится либо дополнительное слагаемое в правую часть уравнения (1.2) для описания случайного смещения, либо дополнительное уравнение, которое определяет эволюцию скорости частицы, например, формулы (1.3) и (1.4), соответственно.

В модели, разработанной в рамках настоящей работы, вычисляются изменения как скорости, так и положения частицы. Вследствие этого, движение каждой индивидуальной частицы описывается системой, состоящей из двух уравнений. Используемая система уравнений движения базируется на втором законе Ньютона и представляется в следующем виде:

$$(2.1)$$

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{\mathbf{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_D(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p),$$

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \mathbf{u}_p,$$
(2.2)

где \mathbf{u}_p – скорость частицы, \mathbf{x}_p – её координата, t – время, \mathbf{g} – ускорение силы тяжести, ρ_p – плотность частицы (её материала), ρ – плотность окружающего воздуха, \mathbf{u} – его скорость, F_D – коэффициент силы сопротивления среды.

В представленных уравнениях не рассматриваются столкновения между частицами, поскольку при умеренных концентрациях такие события происходят достаточно редко. В правые части уравнений (2.1)–(2.2) потенциально могут быть включены и другие силы (например, броуновская, термодиффузионная), однако предполагается, что основной сферой применения модели являются условия плотной воздушной среды в нижней тропосфере. При таких условиях плотность материала частиц значительно превосходит плотность воздуха, вследствие чего внешние силы (силы тяжести и сопротивления среды), включённые в уравнения (2.1)–(2.2), играют доминирующую роль.

Первый член в правой части уравнения (2.1) описывает силу плавучести, которая является результирующей силы тяжести и силы Архимеда. Второй член представляет силу аэродинамического сопротивления среды, ответственную за торможение частицы или, напротив, её увлечение воздушным потоком. Такие параметры, как ускорение свободного падения, плотность воздуха и плотность материала частицы, могут быть заданы как константы либо импортированы из внешних файлов. При этом каждая частица может обладать индивидуальными значениями плотности и диаметра. Скорость воздушного потока и коэффициент силы сопротивления, в свою очередь, определяются с помощью параметризаций, использующих входные поля метеовеличин.

Параметризации – упрощенные математические описания физических процессов – применяются в разработанной модели для представления силы сопротивления среды, эффектов турбулентности, распада частиц с конечным временем жизни, взаимодействия частиц с твердыми поверхностями, а также для учёта влияния высоких концентраций частиц на стратификацию атмосферы. Для большинства из этих процессов реализован выбор из нескольких альтернативных параметризаций, что позволяет подбирать наиболее подходящую для решения конкретной задачи.

Коэффициент силы сопротивления среды F_D в модели может быть рассчитан одним из двух методов. Первый из них является более универсальным, так как он описывает

сопротивление среды при движении сферических частиц в произвольном направлении и задается следующей формулой [Gosman, 1983]:

$$F_D = \frac{3\mu C_D Re}{4\rho_p d_p^2}, \quad (2.3)$$

где μ – динамическая вязкость воздуха, Re – число Рейнольдса для частицы, d_p – диаметр частицы, C_D – коэффициент сопротивления среды, рассчитываемый по эмпирическим формулам для сферических частиц из работы [Morsi, 1972]:

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2}, \quad (2.4)$$

где значения коэффициентов a_1 , a_2 , a_3 зависят от диапазона значений числа Рейнольдса для частицы (8 диапазонов в интервале значений Re от 0 до 50000).

Число Рейнольдса для частицы рассчитывается следующим образом:

$$Re = \frac{\rho d_p |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}|}{\mu} \quad (2.5)$$

Альтернативный способ расчета силы сопротивления среды F_D представляет собой более простую формулу, являющуюся следствием закона Стокса для крупных оседающих частиц [Fletcher, 1962; Budd, 1966]. Данный метод был введен в модель для обеспечения сопоставимости с некоторыми эйлеровыми аналитическими решениями, в которых рассматривается движение крупных снежных частиц [Wamser, Lykossov, 1995]. Эта параметризация также применима и в других задачах, где выполняется указанное условие. В таком случае F_D вычисляется по следующему выражению:

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \quad (2.6)$$

Поле скорости воздушного потока отличается высокой пространственно-временной изменчивостью, в связи с чем оно, как правило, вносит основной вклад в изменение скорости частиц и определяет характер их распространения. Источником информации о скорости потока могут служить данные натурных измерений, результаты расчётов гидродинамических моделей или аналитические решения.

Но эти данные представляют собой лишь аппроксимацию реального течения. Они либо являются результатом осреднения по времени или пространству, либо заданы на сетке с определённым шагом – в результате процессы, масштаб которых меньше шага сетки или шага по времени, явным образом не воспроизводятся. Поскольку размер аэрозолей значительно меньше шага сетки входных данных, частицы могут продолжительное время находиться

внутри одной ячейки, попадая под влияние подсеточных вихрей. Поэтому учёт воздействия турбулентности на их движение приобретает особую важность.

В описываемой модели влияние турбулентности учитывается путём представления скорости потока в виде следующей суммы:

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (2.7)$$

где \mathbf{u} – полная скорость потока, $\bar{\mathbf{u}}$ – осреднённая (например, по Рейнольдсу или по времени) скорость потока, \mathbf{u}' – пульсационная (подсеточная) составляющая. Осреднённая по времени компонента скорости либо считается из входных данных, либо задаётся аналитически, в то время как пульсационная составляющая рассчитывается отдельно с использованием специальных турбулентных параметризаций, которые будут рассмотрены далее.

В модели применяются два типа таких параметризаций: стохастические модели нулевого и первого порядков. Реализовано три варианта, относящихся к моделям нулевого порядка, а именно: простая гауссова модель, модель случайных блужданий и модель случайных смещений. В первых двух из перечисленных моделей пульсация скорости представляет собой случайную величину ξ , имеющую нормальное распределение со средним, равным нулю, и со среднеквадратическим отклонением, которое определяется турбулентной кинетической энергией (ТКЭ):

$$\mathbf{u}' = \xi, \quad \sigma_{\xi} = \sqrt{\frac{2E}{3}}, \quad (2.8)$$

где σ_{ξ} – среднеквадратическое отклонение, E – турбулентная кинетическая энергия.

В рамках простой гауссовой параметризации случайная величина ξ генерируется на каждом шаге конечно-разностной схемы по времени, что имитирует воздействие на частицу различных подсеточных вихрей. В отличие от этого, в модели случайных блужданий вводится понятие времени взаимодействия частицы с турбулентным вихрем t_{int} . В течение этого интервала времени пульсационная компонента скорости остаётся неизменной, характеризуя влияние одного конкретного вихря [Gosman, 1983]:

$$t_{int} = \min(t_e, t_R) \quad (2.9)$$

где t_e – время жизни вихря, t_R – время пересечения вихря частицей. После того, как время пребывания частицы в вихре превышает t_{int} , для неё вихрь «обновляется»: генерируется новая пульсационная компонента скорости потока по (2.8) и пересчитывается t_{int} (2.9).

В том случае, когда частица перемещается относительно среды настолько медленно, что остаётся в зоне влияния одного вихря на протяжении всего времени его жизни, t_{int} принимается

равным t_e . Если же относительная скорость частицы оказывается достаточно высокой для её прохождения сквозь вихрь за более короткое время, то используется значение t_R . Временные масштабы существования вихря и его пересечения частицей вычисляются по следующим формулам [Gosman, 1983]:

$$t_e = \frac{l_e}{|\mathbf{u}'|}, \quad (2.10)$$

$$t_R = -\tau \ln \left[1 - \frac{l_e}{\tau |\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|} \right], \quad (2.11)$$

где l_e – характерный размер случайного вихря, τ – период релаксации частицы:

$$l_e = \sqrt{C_\mu \frac{E^{\frac{3}{2}}}{\epsilon}}, \quad (2.12)$$

$$\tau = \frac{\frac{4}{3} \rho_p d_p}{\rho C_D |\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|}, \quad (2.13)$$

где C_μ – константа, ϵ – скорость диссипации ТКЭ.

Для широкого класса задач атмосферной дисперсии, где рассматриваются аэрозоли малого размера (пассивные частицы с малым временем релаксации), полная система уравнений (2.1)–(2.2) может быть значительно упрощена. Для таких частиц число Стокса (St), определяемое как отношение времени релаксации частицы к временному масштабу турбулентности, мало ($St \ll 1$). В этом приближении инерцией частиц можно пренебречь, полагая, что они практически мгновенно подстраиваются под локальную скорость потока.

В этом случае вместо системы дифференциальных уравнений для скорости и координат решается одно стохастическое уравнение для приращения координаты частицы на основе уравнения (1.3). Изменение положения частицы $x_{p,i}$ по i -ой оси за время dt описывается суммой адвективного переноса, стохастического смещения и гравитационного оседания:

$$dx_i^p = \bar{u}_i dt + dx_i' + u_{s,i} dt, \quad (2.14)$$

где \bar{u}_i – компонента осреднённой скорости потока, dx_i' – смещение за счет подсеточной турбулентности, $u_{s,i}$ – установившаяся скорость гравитационного оседания.

Подсеточное смещение dx_i' рассчитывается с использованием модели случайных смещений (Random Displacement Model, RDM). Для RDM доказана эквивалентность лагранжева и эйлера подходов при описании полей концентрации частиц [Durbin, 1983; Boughton et al., 1987; Glazunov, 2016]. Подобное соответствие даёт возможность проводить верификацию модели путём сравнения её расчётов с аналитическими решениями, которые, как

правило, существуют только для эйлеровой постановки. В отличие от простых гауссовых моделей, в RDM явно вводится член дрейфовой коррекции, пропорциональный градиенту коэффициента турбулентной диффузии. Это необходимо для выполнения "условия хорошего перемешивания" (см. далее в этом разделе) и предотвращения нефизического скопления частиц в зонах с неоднородной турбулентностью [Glazunov et al., 2016]:

$$dx'_i = \frac{\partial K_s}{\partial x_i} dt + \sqrt{2K_s} \xi_i, \quad (2.15)$$

где ξ_i – гауссова случайная величина с нулевым средним и дисперсией dt (приращение винеровского процесса) для i -ой оси, K_s – коэффициент подсеточной турбулентной диффузии.

Скорость гравитационного оседания $u_{s,i}$ для вертикальной компоненты ($i = 3$) определяется законом Стокса на основе уравнения (2.6), а для горизонтальных компонент равна нулю:

$$u_{s,x} = u_{s,y} = 0, \quad u_{s,z} = \frac{gd_p^2}{18\mu} (\rho_p - \rho), \quad (2.16)$$

Данное приближение справедливо для частиц размером до 50-100 мкм (при плотности до нескольких тысяч кг/м³, характерной для минеральной пыли), что покрывает диапазон PM_{2.5} и PM₁₀ и все остальные типы частиц, рассматриваемые в данной работе.

Описанная выше модель RDM является эффективным инструментом для пассивных примесей. Однако для более крупных и тяжелых частиц, обладающих существенной инерцией, приближение мгновенной подстройки под поток становится некорректным. В таких случаях необходимо использовать полную систему уравнений (2.1)–(2.2), где эволюция скорости частицы рассчитывается с учетом сил сопротивления среды.

Описанные выше параметризации относятся к классу стохастических моделей нулевого порядка. В них пульсационная компонента скорости генерируется на каждом шаге по времени независимо от своих предыдущих значений, вследствие чего турбулентное движение представляется как последовательность случайных смещений. При таком подходе автокорреляция между смещениями отсутствует (или заложена в подход неявно, как в случае модели случайных блужданий), хотя в реальности подсеточные вихри могут быть достаточно крупными, чтобы оказывать воздействие на одну и ту же частицу в течение нескольких шагов по времени.

Этот эффект временной корреляции учитывается в более сложных стохастических моделях первого порядка. Их ярким представителем является модель Ланжевена, где турбулентное движение описывается как последовательность случайных приращений скорости с затухающей по времени корреляцией. Такой подход обеспечивает наличие

автокорреляции смещений, причём степень этой корреляции определяется коэффициентами затухания.

На базе уравнения Ланжевена в модели была реализована турбулентная параметризация, относящаяся к стохастическим моделям первого порядка. Исходное уравнение Ланжевена (1.4) было модифицировано таким образом, чтобы структурная функция приращений пульсационной скорости меняла свой вид в зависимости от значения параметра H . Решается следующее уравнение [Reynolds, 2002]:

$$d\mathbf{u}' = -\frac{1}{2}b^2 \frac{\mathbf{u}'}{\sigma_u^2} dt^{2H} + \frac{\mathbf{u}'}{\sigma_u} \frac{d\sigma_u}{dt} dt + b\xi, \quad (2.17)$$

где $b^2 = C_0 \varepsilon T^{1-2H}$ [Thomson, 1987; Sawford, 1993], σ_u^2 – дисперсия скорости потока \mathbf{u} , C_0 – постоянная Колмогорова, ε – скорость диссипации турбулентной кинетической энергии, H – степень, аналог показателя Хёрста, T – временной масштаб, определяемый по формуле:

$$T = \left(\frac{4C_1}{3C_0} \right)^3 \frac{|V_T^2|}{\varepsilon}, \quad (2.18)$$

где C_1 – универсальная константа, $V_T = \mathbf{g}/F_D$ – установившаяся скорость падения.

Следует отметить, что в отличие от ранее рассмотренных параметризаций, здесь определяется не сама пульсационная компонента скорости, а её приращение. Это позволяет классифицировать данную модель как стохастическую модель первого порядка.

При подстановке значения $H = 1/2$ уравнение (2.17) упрощается до стандартного уравнения Ланжевена вида (1.4). Тем не менее, в работе [Reynolds, 2002] указывается, что для очень тяжёлых частиц, для которых выполняется условие $V_T \gg \sigma_u$, следует применять степень $H \in [1/3, 1/2]$, где точное значение зависит от временного масштаба T . В турбулентной атмосфере условие $V_T \gg \sigma_u$ справедливо только для частиц с очень высокой скоростью оседания. Такие частицы не могут долго находиться во взвешенном состоянии и быстро осаждаются на подстилающую поверхность. Их перенос воздушным потоком незначителен, а распространение в пространстве весьма ограничено. Кроме того, при значениях H , отличных от $1/2$, уравнение (2.17) теряет сходимость относительно шага по времени из-за присутствия в первом слагаемом справа множителя dt^{2H} .

Различие в результатах расчётов, полученных с разным шагом по времени при использовании степеней $H = 1/3$ и $H = 1/2$, наглядно демонстрируется на рисунках 2.1а и 2.1б. В численном эксперименте на нижней границе области моделирования задавался поток частиц с размером 20 мкм и плотностью 1000 кг/м³. Рассматривались стационарные метеорологические условия, соответствующие нейтральному логарифмическому слою, в

результате чего в уравнении (2.17) величина $d\sigma_u/dt$ и второй член в правой части становились равными нулю. Целью эксперимента было исследование установившегося стационарного вертикального профиля концентрации частиц. Как видно из результатов, при использовании степени $H = 1/3$ (рис. 2.1а) профили, рассчитанные с разными шагами по времени, существенно различаются. В то же время для случая $H = 1/2$ (рис. 2.1б) шаг по времени не оказывает заметного влияния на профиль концентраций, что свидетельствует о сходимости решения при данных шагах.

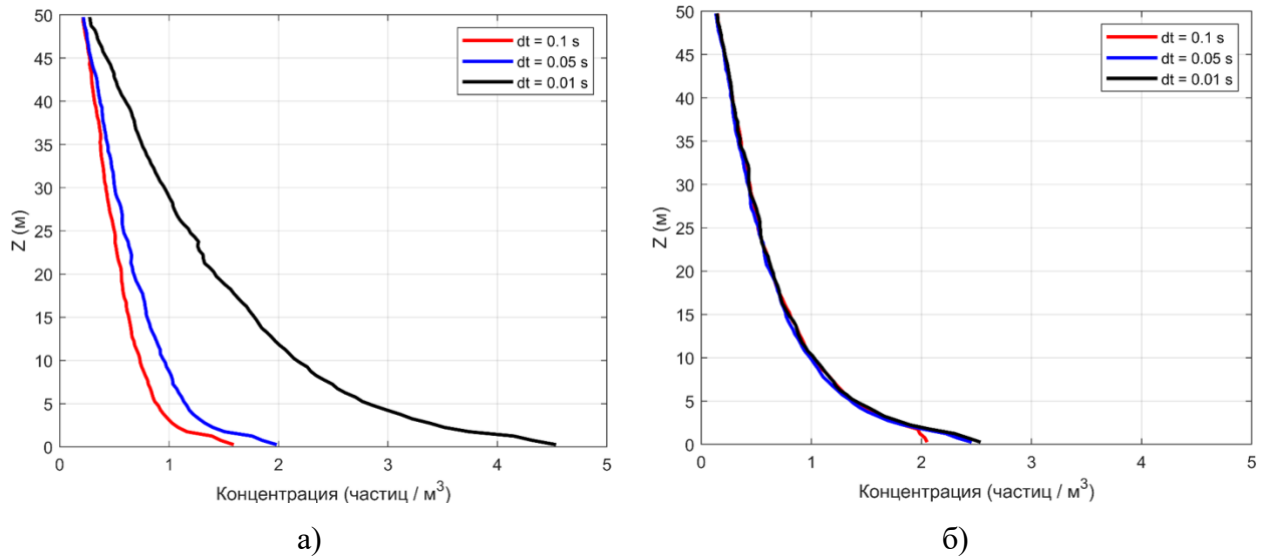


Рисунок 2.1. Вертикальные профили концентрации частиц, рассчитанные с использованием модели Ланжевена (2.17) при $H = 1/3$ (а) и $H = 1/2$ (б) с разными шагами по времени.

Учитывая перечисленные особенности, при исследовании переноса взвешенных в воздухе частиц в разработанной модели для уравнения (2.17) в настоящей работе используется степень $H = 1/2$. Вследствие этого уравнение сводится к стандартной форме уравнения Ланжевена:

$$du'_i = -\frac{1}{2}b^2 \frac{u'_i}{\sigma_{u_i}^2} dt + b\xi_i, \quad (2.19)$$

где $b^2 = C_0\varepsilon, \sigma_{u_i}^2$ – дисперсия компоненты скорости потока для i -ой оси.

Однако, несмотря на свою фундаментальность, данная стандартная форма уравнения Ланжевена, которую для удобства будем далее обозначать LSM0 (Langevin stochastic model 0), обладает известным теоретическим недостатком. Проблема заключается в том, что эта модель не удовлетворяет так называемому «условию хорошего перемешивания» (УХП), сформулированному Томсоном [Thomson, 1987].

Суть этого фундаментального критерия заключается в следующем: если ансамбль частиц изначально распределён в пространстве равномерно (т.е. концентрация постоянна), то физически корректная стохастическая модель должна сохранять это равномерное распределение с течением времени. Модель не должна искусственно создавать градиенты концентрации или приводить к ложному накоплению частиц. Модели, не удовлетворяющие УХП, в неоднородном турбулентном потоке генерируют нефизический «ложный дрейф». Как показано в работе [Glazunov et al., 2016] для случая плоской поверхности, этот дрейф может приводить к неточностям в расчёте вертикального распределения частиц, в частности, к избыточному вертикальному перемешиванию.

Хотя для идеализированных условий слабые стороны модели LSM0 известны, её поведение в сложном турбулентном поле городского пограничного слоя ранее подробно не исследовалось. Для устранения указанного недостатка и обеспечения выполнения УХП (по крайней мере, для одномерной диффузии по вертикали) в разработанной модели была также реализована более сложная стохастическая модель первого порядка на основе уравнения Ланжевена, обозначаемая как LSM1. В ней горизонтальные компоненты скорости u' и v' рассчитываются по уравнению (2.19), а математическая формулировка для приращения вертикальной компоненты скорости w' вдоль траектории частицы имеет следующий вид [Glazunov et al., 2016]:

$$dw' = \left(-\frac{1}{2} b^2 \frac{w'}{\sigma_w^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \left(1 + \frac{w'^2}{\sigma_w^2} \right) \right) dt + b \xi_3, \quad (2.20)$$

где σ_w^2 – дисперсия вертикальной компоненты скорости потока, ξ_3 – гауссова случайная величина для оси Z .

Дополнительно в модель была включена возможность учёта распада частиц. Эта функция актуальна для моделирования биоаэрозолей, радиоактивных частиц, а также некоторых химически активных аэрозольных соединений – для любых частиц с ограниченным временем жизни, которое может варьироваться в зависимости от их типа и происхождения. В реализованном алгоритме время жизни частицы задаётся через её период полураспада. Зависимость количества «живых» частиц от времени описывается законом полураспада в следующей форме:

$$N(t) = N_0 \cdot 2^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (2.21)$$

где N – число частиц в момент времени t , N_0 – начальное число частиц, τ – период полураспада для данных частиц.

Из формулы (2.21) можно рассчитать вероятность распада P_{decay} для каждой частицы на каждой итерации цикла по времени с шагом по времени Δt :

$$P_{decay}(\Delta t) = \frac{N_t - N_{t+\Delta t}}{N_t} = 1 - 2^{-\frac{\Delta t}{\tau}}, \quad (2.22)$$

Для каждой "живой" частицы на каждом шаге по времени генерируется случайная величина r , имеющая равномерное распределение на интервале $(0, 1)$. Частица считается распавшейся ("отмершей"), если выполняется условие $r < P_{decay}$. Распавшиеся частицы удаляются из расчёта: для них более не решаются уравнения движения, и они не учитываются при вычислении концентраций.

За влияние высоких концентраций частиц на стратификацию атмосферы отвечает отдельная параметризация. Как правило, воздействие переносимых частиц на термогидродинамическое состояние воздушной среды считается пренебрежимо малым в сопоставлении с влиянием внешних факторов, а также начальных и граничных условий. Это допущение справедливо почти при любых концентрациях, однако существуют исключения, такие как сильнейшие метели или песчаные бури. В ходе подобных событий концентрация частиц может достигать столь высоких значений, что начинает оказывать заметное влияние на стратификацию атмосферы по плотности, по меньшей мере, в приземном слое.

Для изучения таких явлений в модели была реализована параметризация обратного влияния частиц на стратификацию атмосферы (Kondo et al., 1978; Soulsby and Wainwright, 1987; Wamser, Lykossov, 1995). Данный механизм рассматривается для условий, когда по температуре наблюдается нейтральная стратификация приземного слоя, для которой профиль коэффициента турбулентной диффузии имеет следующий вид:

$$K_s = u_* \kappa z, \quad (2.23)$$

где u_* – скорость трения, κ – константа Кармана, $\kappa \approx 0.4$, z – вертикальная координата.

В таком случае эффект обратного влияния примесей на стратификацию можно выразить через изменение профиля коэффициента турбулентной диффузии:

$$K_s = \frac{u_* \kappa z}{1 + \beta z/L}, \quad (2.24)$$

где β – константа, L – масштаб длины Обухова, вычисляемый по следующей формуле:

$$L = \frac{(1 + \sigma s) u_*^3}{\kappa g w_s \sigma s}, \quad (2.25)$$

где s – объёмная концентрация частиц, σ – относительная разница плотностей, $\sigma = (\rho_p - \rho)/\rho$, w_s – скорость гравитационного оседания частиц, вычисляемая на основе закона Стокса:

$$w_s = \frac{\sigma g d_p^2}{18 \mu \rho}, \quad (2.26)$$

Вычисление концентраций частиц в ячейках сетки и пересчёт новых значений коэффициента турбулентной диффузии и его производных производятся на каждом шаге по времени. Подобные расчёты обладают высокой вычислительной стоимостью и могут существенно увеличить время счёта. По этой причине данная параметризация предназначена только для специальных экспериментов, которые нацелены на изучение процессов с участием очень высоких концентраций частиц.

2.3 Взаимодействие частиц с поверхностями

Для выполнения расчётов в условиях городской застройки или любой другой идеализированной геометрии, отличающейся от плоской поверхности, необходимо описывать взаимодействие частиц с твёрдыми объектами, такими как стены и крыши зданий. В разработанной модели предусмотрено два типа такого взаимодействия: при контакте с твёрдым телом частица либо прилипает к нему, либо совершает упругий отскок. Выбор конкретного сценария зависит от настроек, заданных для данной поверхности. Реализовано два метода задания твёрдых препятствий и математического описания взаимодействия частицы с поверхностью.

Первый метод, условно названный «полигональная геометрия» (рис. 2.2а), является более точным, но и более ресурсоёмким. В этом подходе твёрдые поверхности определяются через структуру данных, которая содержит информацию о вершинах выпуклого четырёхугольника (одна стена) и векторе единичной внешней нормали к нему. Подобное представление геометрии позволяет описывать не только простые здания-параллелепипеды, но и более сложные архитектурные формы. Важное преимущество данного подхода заключается в том, что здание или другой объект может иметь произвольную ориентацию в пространстве, не будучи привязанным к регулярной сетке. Для каждой частицы выполняется проверка, достигнет ли она на текущем временном шаге плоскости одной из стен. В случае достижения проверяется, попадёт ли частица в границы самой стены или пролетит мимо. Если частица попадает в стену, происходит упругий отскок или осаждение.

Второй метод, «сеточная геометрия» (рис. 2.2б), математически значительно проще и обеспечивает ускорение расчётов для случаев с простой геометрией. Вместо задания поверхностей в этом подходе определяются твёрдые ячейки сетки – то есть ячейки, полностью занятые зданиями или другими непроницаемыми объектами. Затем для каждой частицы

проверяется, окажется ли она на текущем временном шаге внутри одной из таких твёрдых ячеек. При положительном результате происходит упругий отскок от соответствующей грани этой ячейки или осаждение на ней. Такой подход даёт возможность успешно реализовывать идеализированные постановки задач (например, городской каньон), а при достаточно высоком разрешении расчётной сетки – аппроксимировать реалистичную городскую застройку, что широко применяется во многих гидродинамических моделях [Blocken, 2018].

Результат взаимодействия частицы с поверхностью определяется на основе вероятности осаждения, заданной для данного типа поверхности. Вероятность осаждения может быть задана в интервале $[0, 1]$, где 0 – всегда упругий отскок, а 1 – всегда осаждение на поверхности. Значение вероятности для частицы и типа поверхности в модели должно быть задано заранее, но при внедрении соответствующей параметризации может рассчитываться при каждом столкновении.

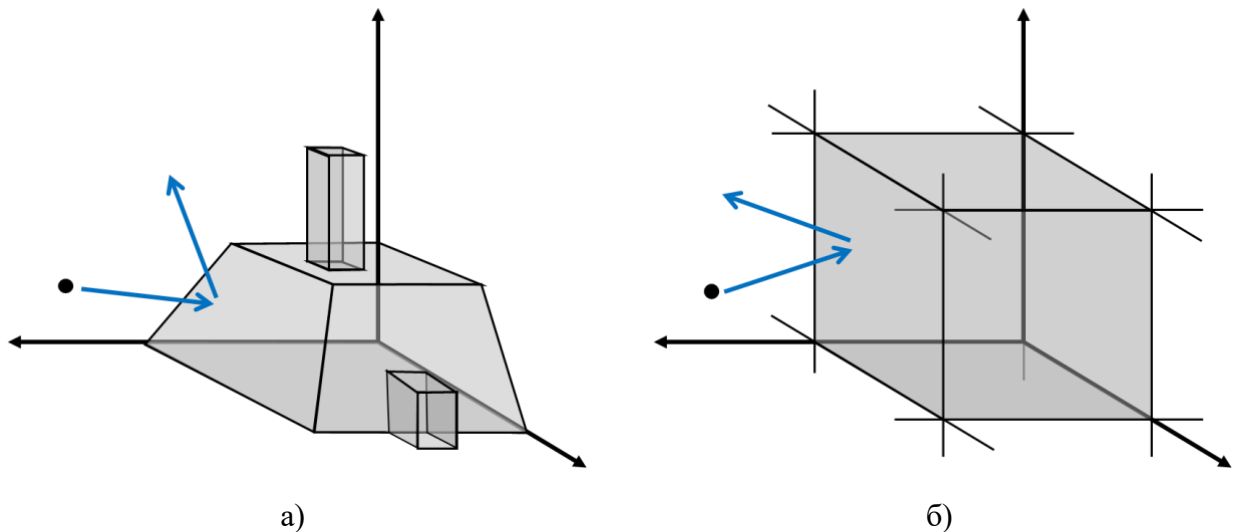


Рисунок 2.2. Показательные схемы описания геометрии и упругого отскока в параметризациях «полигональной геометрии» (а) и «кубической геометрии» (б).

2.4 Численная реализация

Для нахождения траектории каждой частицы требуется решить систему уравнений (2.1) и (2.2). При условии равенства скоростей частицы и потока, когда исчезает сила трения, можно путём интегрирования получить полуаналитические выражения. Однако это условие не выполняется при большом шаге по времени или в случае нарушения гидродинамического равновесия частицы с воздушным потоком. Это обстоятельство не позволяет применять данный подход для моделирования в условиях сложных течений и тяжёлых инерционных

аэрозолей, так как частицы будут постоянно выходить из состояния динамического равновесия со средой.

Для решения этой проблемы применяются другие конечно-разностные методы. В ранних версиях модели использовался явный метод Рунге-Кутты 4-го порядка, требующий значительного объёма вычислений. На текущий момент он заменён комбинацией более простых методов.

В актуальной версии модели выбор численной схемы интегрирования зависит от используемой физической постановки. В случае использования модели RDM (для пассивных частиц) применяется явная схема Эйлера первого порядка. Новая координата частицы $x_{p,i}^{n+1}$ на шаге $n + 1$ вычисляется как:

$$x_{p,i}^{n+1} = x_{p,i}^n + \left(u_i^n + u_{s,i} + \frac{K_s^{j+1} - K_s^{j-1}}{2\Delta x_i} \right) \Delta t + \xi_i \sqrt{2K_s^j}, \quad (2.27)$$

где Δt – шаг по времени, Δx_i – шаг сетки, индексы j обозначают узлы сетки для аппроксимации градиента коэффициента диффузии методом центральных разностей (схема для градиента K_s может отличаться, если значения градиента уже есть во входных данных).

Для полной инерционной модели на основе уравнений (2.1)–(2.2) применяется комбинация явной схемы Эйлера первого порядка для скорости частицы и полуявной схемы Кранка-Николсон для её координаты. Переход на такую численную схему с метода Рунге-Кутты позволил при незначительной потере точности существенно уменьшить вычислительную стоимость и ускорить работу модели. Уравнения для данной конечно-разностной схемы записываются в следующем виде:

$$\mathbf{u}_p^{n+1} = \frac{\mathbf{u}_p^n + \Delta t(\mathbf{a} + \frac{\mathbf{u}_p^n}{\tau_D})}{1 + \frac{\Delta t}{\tau_D}}, \quad \mathbf{a} = \frac{g(\rho_p - \rho)}{\rho_p}, \quad \tau_D = \frac{1}{F_D} \quad (2.28)$$

$$\mathbf{x}_p^{n+1} = \mathbf{x}_p^n + \frac{1}{2} \Delta t (\mathbf{u}_p^n + \mathbf{u}_p^{n+1}) \quad (2.29)$$

2.5 Структура и алгоритм работы в автономном режиме

В разработанной модели реализован гибридный подход: движение частиц описывается в лагранжевой постановке, в то время как характеристики воздушной среды, используемые как внешние параметры в лагранжевых уравнениях, задаются эйлеровым методом в виде трёхмерных полей на дискретной сетке. Эти поля, включающие компоненты скорости ветра и параметры турбулентности, а также их эволюция во времени, определяются через входные

данные. Источником этих данных могут служить как расчёты различных гидродинамических моделей, так и аналитические выражения.

Основу работы модели составляет итерационный процесс, который реализует последовательность шагов по времени в пределах заданного периода моделирования. Схематическое представление алгоритма работы модели приведено на рисунке 2.3.

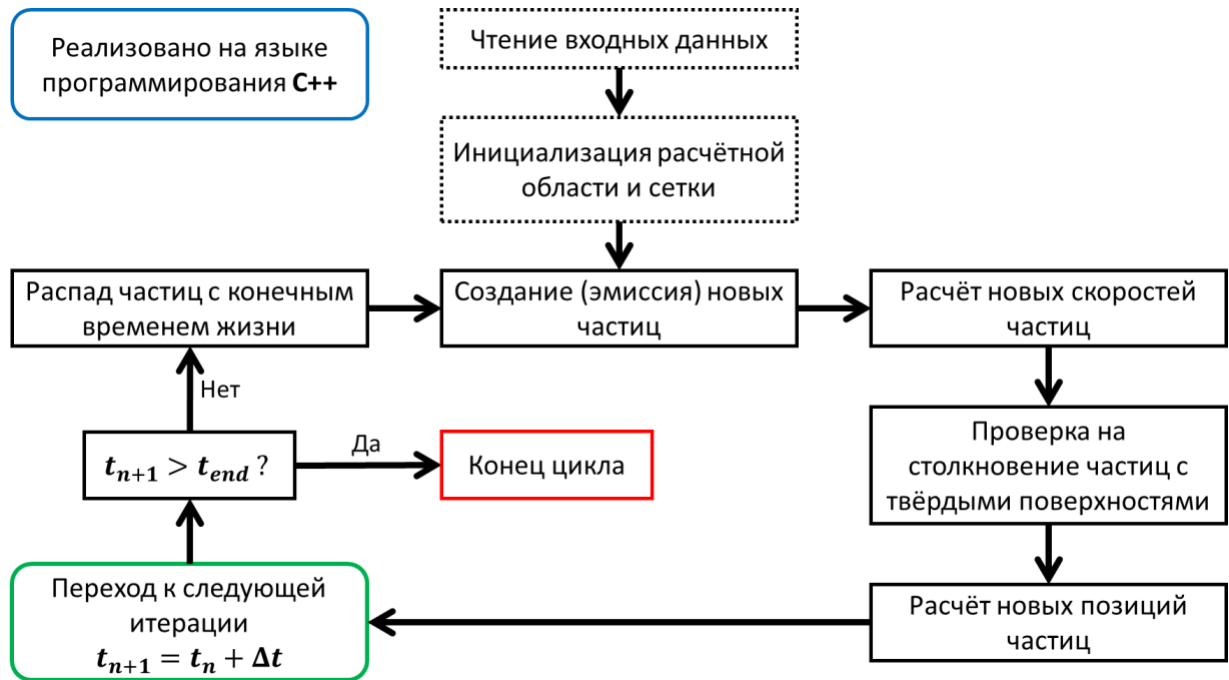


Рисунок 2.3. Схема рабочего алгоритма модели лагранжева переноса частиц.

Для инициализации модели и интегрирования её уравнений необходимы входные данные, которые описывают термогидродинамические характеристики воздушной среды и геометрические параметры ограниченной трёхмерной области в заданные моменты времени. В качестве таких данных выступают: во-первых, описание расчётной сетки для исследуемой области; во-вторых, количество моментов времени с внешними данными и временные интервалы между ними; в-третьих, значения различных метеовеличин в каждом узле сетки. В настоящее время к используемым термогидродинамическим характеристикам атмосферы относятся: трёхмерные компоненты скорости ветра, турбулентная кинетическая энергия, её скорость диссипации, а также коэффициент турбулентной диффузии.

В модели применяется расчётная сетка типа «С» по классификации Аракавы, что означает, что значения скалярных величин относятся к центрам ячеек, а компоненты скорости течения – к граням ячеек. В соответствии с входными данными эта сетка привязывается к декартовой системе координат и заданной точке отсчёта. Поскольку размеры ячеек исходной сетки G_1 могут быть различными вдоль осей координат (например, в случае неравномерной

телескопической сетки с ростом вертикального размера ячеек с высотой), после считывания входных данных создаётся дополнительная, вспомогательная сетка G_2 , которая является равномерной. Размер её ячейки вдоль определённой оси задаётся равным наибольшему общему кратному всех длин ячеек сетки G_1 вдоль той же оси (рис. 2.4). Такое построение подразумевает, что шаги исходной сетки вдоль любой из осей соотносятся между собой как целые числа.

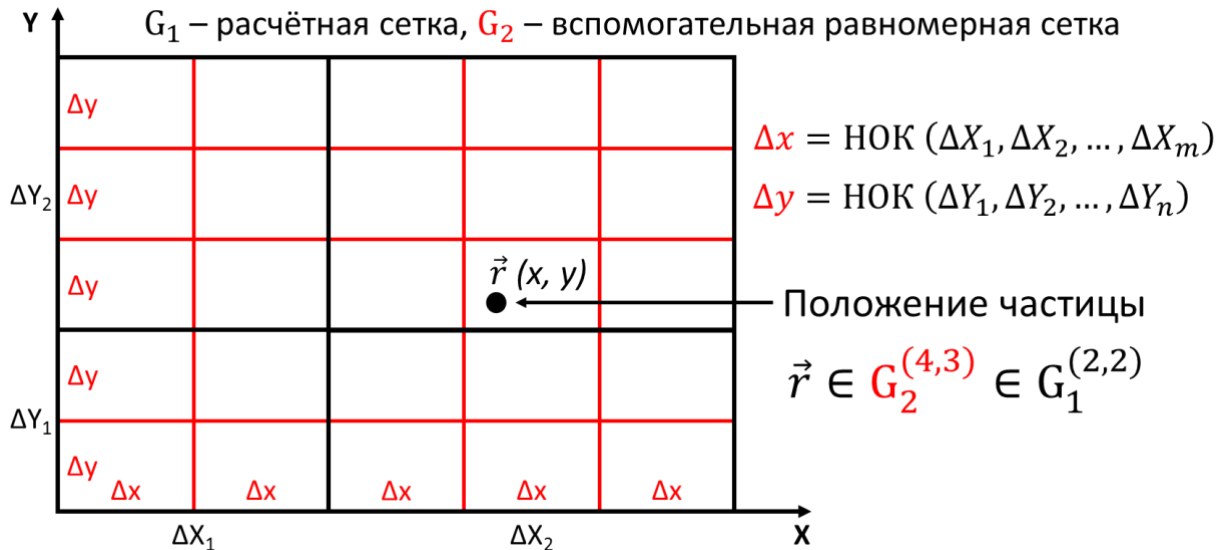


Рисунок 2.4. Сетка входных эйлеровых данных и вспомогательная сетка лагранжевой модели.

В результате такого подхода каждая ячейка исходной сетки G_1 делится на целое число идентичных ячеек вспомогательной сетки G_2 . Это даёт возможность оперативно определять, в какой ячейке основной сетки G_1 находится частица в данный момент времени, для чего достаточно вычислить номер содержащей её ячейки сетки G_2 по следующей формуле:

$$N_i = \left\lfloor \frac{x_i^p - x_i^{grid}}{\Delta x_i} \right\rfloor \quad \text{для } i = 1, 2, 3, \quad (2.30)$$

где N_i – индекс ячейки сетки G_2 по i -ой оси, x_i^p – координата частицы по i -ой оси, x_i^{grid} – координата точки отсчёта по i -ой оси, Δx_i – размер ячейки сетки G_2 по i -ой оси.

Вычисление значений метеовеличин для точек, расположенных между узлами основной сетки G_1 , выполняется методом трилинейной интерполяции по 8-ми соседним узлам. В случае, когда частица находится между крайним узлом и границей области, применяется билинейная интерполяция по 4-м ближайшим узлам. По аналогии, для граней и углов расчётной области используется линейная интерполяция между 2-мя ближайшими точками или же значение из

единственного ближайшего узла соответственно. Если для какой-либо метеовеличины задано граничное условие (в случае её задания через аналитические выражения), оно учитывается в приоритетном порядке при вычислении значений вблизи границы области.

При отсутствии твёрдых препятствий на границах расчётной области для частиц могут быть установлены граничные условия следующих типов:

- **Проницаемая граница:** частицы, достигшие такой границы, считаются покинувшими область, и их дальнейший расчёт прекращается.
- **Периодическая граница:** частица, покинувшая область, переносится и вновь входит в неё с противоположной стороны.
- **Закрытая граница:** частица не может пересечь границу и совершает упругий отскок от неё.

В качестве основного результата расчётов модель выводит в отдельные файлы поля концентрации в ячейках сетки. Дополнительно могут быть сохранены траектории всех частиц и другие данные, например, концентрации осаждённых частиц на поверхностях, параметры геометрии твёрдых тел и различная описательная статистика. В процессе выполнения расчёта модель периодически выводит в консоль статистические сводки, отражающие динамику числа частиц (количество всех частиц, активных, покинувших область и т.д.). На рисунке 2.5 приведён пример визуализации рассчитанных траекторий частиц для эксперимента по расчёту переноса примеси в серии перпендикулярных ветру городских каньонов.

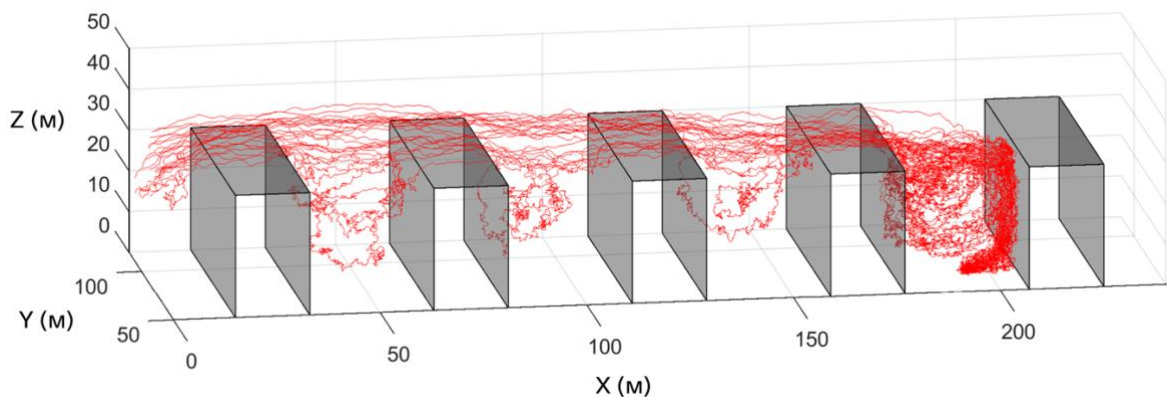


Рисунок 2.5. Визуализация траекторий частиц в серии городских каньонов.

Вычислительная стоимость конкретного численного эксперимента определяется совокупностью факторов, среди которых: количество частиц, продолжительность периода моделирования, выбранные параметризации, разрешение расчётной сетки, а также число отдельных твёрдых ячеек или поверхностей и характер метеорологических условий. Столь большое число зависимостей делает производительность модели нелинейной по числу частиц,

однако лагранжев подход открывает широкие возможности для её оптимизации. Лагранжевы методы обладают высоким потенциалом для распараллеливания вычислений, поскольку в большинстве задач отсутствует необходимость учёта взаимодействий между частицами, что позволяет проводить независимые расчёты для каждой частицы или их групп. Эта независимость расчётов открывает возможность для распараллеливания как по числу частиц, так и посредством декомпозиции вычислительной области. Необходимость реализации этих возможностей стала очевидной в ходе первых же экспериментов с большим числом частиц (порядка 10^6 – 10^8 за один расчёт).

2.6 Вычислительная оптимизация

Для целенаправленной оптимизации алгоритма модели рассмотрим структуру его программной реализации. Её можно условно разделить на четыре основных блока: этап инициализации, блок расчёта динамики, блок обработки данных и блок записи результатов в файл. Основной объём вычислений сосредоточен в блоке расчёта динамики, который представляет собой цикл по времени, где на каждой итерации выполняются эмиссия частиц и расчёт новых координат и скоростей.

Именно поэтому основное внимание было уделено повышению производительности вычислительного ядра. Для этого были использованы три технологии параллельного программирования: OpenMP и MPI для вычислений на центральных процессорах (CPU), а также технология CUDA для адаптации алгоритмов под архитектуру графических процессоров (GPU). Тестирование производительности было выполнено на суперкомпьютере «Ломоносов-2». Характеристики использованной вычислительной системы и полученные оценки ускорения работы модели представлены в табл. 2.1 [Варенцов и др., 2023].

Прежде чем приступить к распараллеливанию, была выполнена оптимизация последовательной версии программного кода. Она заключалась в замене многомерных массивов, использовавшихся для хранения данных, на одномерные. В коде модели присутствовало два таких четырёхмерных (три пространственных измерения и время) массива: основной массив для хранения полей метеовеличин в узлах сетки и вспомогательный массив для агрегирования данных при расчёте концентраций. Их «вытягивание» в одномерные массивы с длиной, равной произведению всех размерностей, позволило сократить время выполнения на 12-27% в зависимости от конфигурации эксперимента. Такое ускорение достигается за счёт более эффективного использования кэш-памяти центрального процессора

и улучшения возможностей для векторизации вычислений. В дальнейшем эта оптимизация была сохранена во всех параллельных реализациях модели.

Таблица 2.1. Характеристики вычислительных систем, использованных в численных экспериментах, и оценки ускорения расчётов для использованных методов.

Архитектура	CPU	GPU	Число процессов	Уменьшение времени расчёта
OpenMP	Intel Xeon E5-2697 v3 2.60GHz	-	14	до 4 раз
MPI	Intel Xeon E5-2697 v3 2.60GHz	-	14	до 8 раз
CUDA	Intel Xeon E5-2697 v3 2.60GHz	Nvidia P100	128 блоков, 64 нити	до 16 раз

Переходя к параллельным реализациям, рассмотрим сначала подход, основанный на общей памяти. Для адаптации программы на OpenMP была использована директива компилятора `#pragma parallel for`, которая применялась к циклам в функциях, рассчитывающих новые координаты и векторы скорости для каждой частицы. Применение OpenMP позволило ускорить весь процесс работы модели до 4 раз при использовании 14 процессов. Эффективность параллельной программы η_r (отношение ускорения к числу процессов) в этой задаче составила $\eta_r \approx 2/7$. Столь невысокое значение эффективности объясняется, в первую очередь, законом Амдала: значительная часть программного кода, в частности, блоки инициализации и обработки статистики, остались последовательными. Их распараллеливание является возможным направлением дальнейшей работы. Ключевым ограничением технологии OpenMP является масштабируемость в пределах одного вычислительного узла с общей памятью, что не позволяет эффективно задействовать ресурсы крупных кластерных систем без привлечения MPI. Однако, поскольку этот подход не требует выделения дополнительной памяти, он является оптимальным для использования на многоядерных персональных компьютерах и рабочих станциях.

Для масштабирования на распределённых системах была реализована версия с использованием технологии MPI. Эта реализация позволила достичь ускорения примерно в 8 раз по сравнению с последовательной версией, что вдвое быстрее варианта с OpenMP для того же блока алгоритмов, а эффективность в данном случае выросла до $\eta_r \approx 4/7$. Главное

преимущество MPI-подхода заключается в использовании распределённой памяти. Каждый MPI-процесс работает с собственным, в n раз меньшим фрагментом общего массива частиц, что повышает локальность данных и эффективность обращений к памяти. Кроме того, это избавляет от необходимости обработки состояний гонки (race conditions) при записи в общую память, что является обязательным для OpenMP. Основным недостатком MPI является необходимость организации обмена данными между процессами. В текущей реализации для сбора статистики и записи результатов используется синхронный алгоритм: на каждом шаге вывода все процессы, кроме корневого, передают ему данные о своих частицах. Этот подход ведёт к дополнительным накладным расходам на память (корневой процесс должен выделить память под все частицы) и коммуникации. Несмотря на это, версия с MPI обладает высоким потенциалом для дальнейшего масштабирования при увеличении числа узлов и является предпочтительной для решения наиболее вычислительно ёмких задач на суперкомпьютерных системах.

Наибольшая производительность была достигнута при использовании вычислений на графических процессорах (GPU). Версия модели, реализованная с помощью технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture), показала ускорение до 16 раз относительно последовательной. Если же анализировать производительность исключительно вычислительного ядра (расчёт новых скоростей и координат), включая накладные расходы на копирование данных между CPU и GPU, то локальное ускорение может достигать 32 раз. Таким образом, среди всех рассмотренных подходов CUDA обладает наибольшим потенциалом для повышения производительности. Однако у этого подхода есть и существенные недостатки. Во-первых, его практическое применение ограничено доступностью специализированного оборудования, так как графические процессоры, поддерживающие CUDA, не являются стандартным компонентом большинства вычислительных систем. Это налагает строгие требования к техническим характеристикам аппаратной платформы. Во-вторых, адаптация программного кода под архитектуру CUDA является нетривиальной и трудоёмкой задачей, требующей от разработчика отдельных компетенций в области параллельного программирования для GPU.

2.7 Верификация модели на аналитических решениях

Оценка точности разработанной модели является необходимым условием для её дальнейшего использования в прикладных задачах. Для верификации могут быть использованы различные типы эталонных данных, среди которых можно выделить три

основные группы: данные натурных измерений, результаты расчётов других, уже верифицированных моделей, и идеализированные аналитические решения.

Ключевой и наиболее часто используемой величиной для сопоставления во всех этих случаях является концентрация частиц. Именно её пространственное распределение может быть как получено из измерений, так и описано аналитически, что открывает широкие возможности для проведения верификации. Однако здесь возникает методологическая особенность: концентрация по своей природе является эйлеровой величиной, описывающей свойство среды в фиксированных точках пространства (например, в ячейках сетки). Так, результаты измерений часто представлены в виде вертикальных профилей концентрации – дискретных значений в одномерной вертикальной сетке. Для корректного сравнения результатов лагранжевой модели с такими эйлеровыми данными необходимо теоретическое обоснование их эквивалентности.

Такое обоснование существует: как было упомянуто ранее, решения лагранжевых и эйлеровых уравнений становятся эквивалентными в терминах поля концентрации при использовании в лагранжевой модели стохастической параметризации типа «модель случайных смещений» (2.14)-(2.15) и шаге по времени, стремящемся к нулю. Данный факт строго доказывается с помощью теории стохастических дифференциальных уравнений с привлечением уравнения Фоккера-Планка [Durbin, 1983; Boughton et al., 1987; Glazunov, 2016]. Таким образом, при использовании достаточно малого шага по времени становится возможным корректное сопоставление полей концентрации, рассчитанных лагранжевой моделью, с аналитическими решениями, полученными в рамках эйлерова подхода.

Первоначальный этап верификации модели включал сопоставление результатов лагранжевых расчётов с эйлеровыми аналитическими решениями, полученными для случая пассивных частиц. В данном случае под пассивными понимаются мелкодисперсные и лёгкие частицы (как правило, размером не более 1-10 мкм), для которых влияние и инерции (ненулевой массы), и гравитационного оседания является пренебрежимо малым.

Аналитические решения для двух идеализированных сценариев были выведены из уравнения (1.1) при следующих допущениях: течение считалось стационарным и горизонтально-однородным по всем термогидродинамическим величинам, а средняя вертикальная скорость принималась равной нулю (приближение пограничного слоя). На нижней границе расчётной области задавался постоянный поток частиц с поверхности, в то время как на верхней границе устанавливалось условие нулевой концентрации: $s(z) = 0$. При таких условиях первый, второй и четвертый члены в уравнении (1.1) обращаются в ноль.

Оставшаяся часть уравнения затем интегрируется по вертикальной координате z , причём вид решения определяется конкретной формой профиля коэффициента турбулентной диффузии.

Первый идеализированный сценарий описывает нейтрально стратифицированный приземный слой с логарифмическим профилем скорости. Для этого случая коэффициент турбулентной диффузии задавался по формуле (2.23), а скорость трения принималась равной $u_* = 0.1$ м/с.

Второй сценарий представляет собой течение Куэтта между двумя параллельными плоскостями. В этой постановке нижняя граница является неподвижным источником частиц с постоянным потоком, а верхняя – границей с условием Дирихле (нулевая концентрация на границе). Наличие двух поверхностей и создаваемого ими сдвигового трения приводит к тому, что коэффициент турбулентной диффузии описывается более сложным выражением:

$$K_s = u_* \kappa \frac{h}{\pi} \sin\left(\pi \frac{z}{h}\right), \quad (2.31)$$

где h – высота верхней границы (движущейся плоскости). Формула (2.31) переходит к линейному профилю (2.23) у каждой из границ.

В условиях отсутствия средней вертикальной компоненты скорости именно коэффициент турбулентной диффузии и его вертикальная производная вносят основной вклад в перенос частиц. Следовательно, вертикальный профиль этого коэффициента будет определять и форму итогового профиля концентрации. На рисунке 2.6 для наглядности представлены вертикальные профили коэффициента турбулентной диффузии для обоих рассмотренных случаев, которые соответствуют уравнениям (2.23) и (2.31).

Интегрирование уравнения (1.1) с учётом вышеописанных условий для логарифмического слоя (используя формулу (2.23) для коэффициента диффузии) приводит к логарифмическому профилю концентрации частиц:

$$s(z) = -\frac{H}{u_* \kappa} \ln \frac{z}{h}, \quad (2.32)$$

где H – поток частиц с поверхности [частиц $\text{м}^{-2} \text{с}^{-1}$].

Для сопоставления численного решения лагранжевой модели с этим аналитическим решением в модели были заданы соответствующие условия: вертикальный профиль коэффициента диффузии по формуле (2.23), нулевая средняя скорость ветра, а также периодические граничные условия на боковых границах. С нижней границы происходила эмиссия частиц размером 1 мкм и плотностью 1000 кг/м^3 , а верхняя граница была проницаемой (поглощающей), что в данном случае эквивалентно эйлеровой постановке (Durbin, 1983).

Результатом расчёта являлся установившийся квазистационарный вертикальный профиль концентрации, который и сопоставлялся с аналитическим решением. Как показано на рисунке 2.7а, модельный (без учёта распада частиц) и аналитический профили практически совпадают, демонстрируя высокий коэффициент корреляции (0.96). Это позволяет сделать вывод о практически полном соответствии эйлера и лагранжева подходов в данном случае.

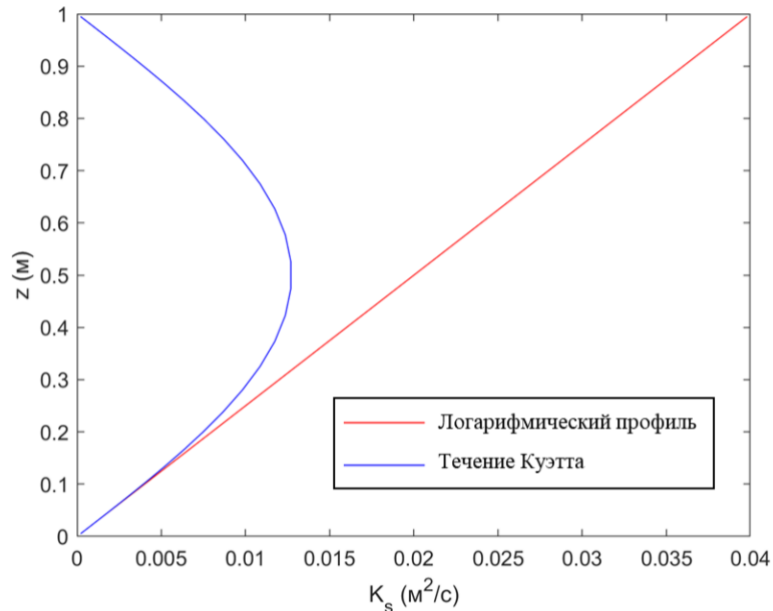


Рисунок 2.6. Вертикальное распределение коэффициента турбулентной диффузии в нейтрально стратифицированном приземном слое с логарифмическим профилем скорости и в течении Куэтта.

Аналогичная процедура была проведена и для течения Куэтта. Интегрирование уравнения (1.1) при использовании формулы (2.31) для коэффициента диффузии и упомянутых граничных условий даёт следующий профиль концентрации:

$$s(z) = -\frac{H}{u_* k} \ln \left| \operatorname{tg} \left(\pi \frac{z}{2h} \right) \right| + C, \quad (2.33)$$

где C – среднее арифметическое концентраций частиц на двух симметричных относительно середины слоя высотных уровнях.

Условия численного эксперимента и процедура сравнения были идентичны предыдущему случаю, за исключением профиля коэффициента турбулентной диффузии, который теперь задавался уравнением (2.31). Результаты этого сравнения представлены на рисунке 2.7б. Модельный и аналитический профили вновь демонстрируют отличное совпадение и высокий коэффициент корреляции (0.99). Небольшие расхождения заметны лишь вблизи нижней границы, что связано с особенностями реализации эмиссии частиц в

лагранжевом подходе. Таким образом, и для этого случая можно говорить о практически полном соответствии двух подходов к расчёту концентрации.

Дополнительно на обеих частях рисунка 2.7 приведены кривые модельных вертикальных профилей концентрации для случаев, когда у частиц при прочих равных условиях задавалось ограниченное время жизни с периодом полураспада от 1 до 100 с. Эти данные демонстрируют возможность модели учитывать распад частиц и то, насколько сильно этот процесс может влиять на пространственное распределение аэрозолей и абсолютные значения концентраций, что может быть важно в задачах с малыми временами жизни (химические реакции, биологически активные аэрозоли).

В заключение этого этапа верификации стоит отметить несколько моментов. Во-первых, была успешно проверена работа лагранжевой модели с параметризацией случайных смещений на аналитических решениях, но только для пассивных частиц. Тестовые расчёты с более тяжёлыми частицами показали, что их профили концентраций существенно отклоняются от полученных аналитических решений. Во-вторых, в данных экспериментах выбор между формулами (2.3) и (2.6) для расчёта силы сопротивления среды не имел значения, поскольку для пассивных частиц этот фактор не оказывает заметного влияния на их перенос.

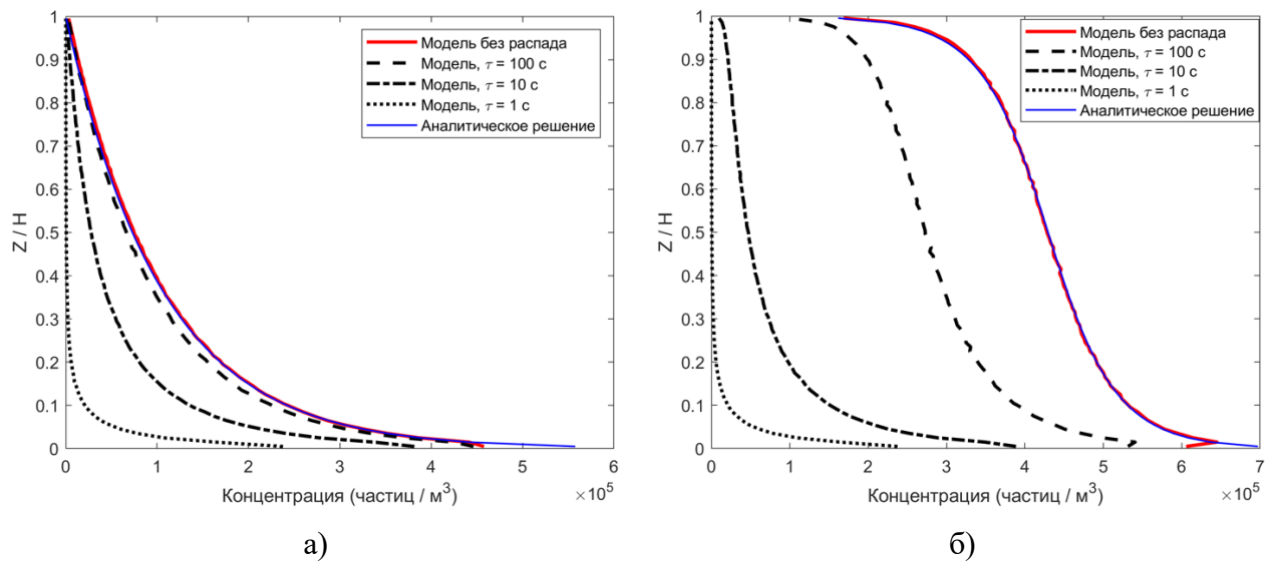


Рисунок 2.7. Профили концентрации частиц в приземном слое для случая логарифмического профиля скорости (а) и течения Куэтта (б) без учёта конечного времени жизни частиц (красная кривая) и с его учётом (чёрные кривые).

Следующий этап верификации был нацелен на проверку корректности моделирования переноса инерционных частиц. Для этого были использованы более сложные аналитические решения, учитывающие влияние их массы и размера. В качестве теоретической основы была

взята работа [Wamser, Lykossov, 1995], посвящённая исследованию скорости трения в условиях сильных метелей. В этой статье приводятся решения для профиля концентрации снежных частиц, которые учитывают их гравитационное оседание. Эти решения выводятся из следующего уравнения, которое может быть получено из уравнения (1.1) при допущениях о стационарности решения, нулевой средней скорости ветра, наличии гравитационного оседания и отсутствии внутренних источников и стоков:

$$K_s \frac{\partial s}{\partial z} = -w_s s. \quad (2.34)$$

Профиль K_s в данной постановке задаётся аналогично случаю логарифмического пограничного слоя – уравнением (2.23). Однако постановка задачи в (Wamser, Lykossov, 1995) не соответствовала возможным настройкам лагранжевой модели, так как не включала граничные условия в виде потока частиц на нижней границе и нулевой концентрации на верхней. В связи с этим потребовалось новое аналитическое решение, с профилем K_s по (2.23), но с вышеуказанными граничными условиями. Для этого решается уравнение (2.34). Оно было проинтегрировано по z от 0 до высоты области h , что позволило учесть граничное условие потока на нижней границе. В результате была получена следующая система, состоящая из преобразованного уравнения (2.34) и условия на верхней границе:

$$\begin{cases} K_s \frac{\partial s}{\partial z} + w_s s = -H, \\ s(h) = S_h \end{cases}, \quad (2.35)$$

где H – поток частиц на нижней границе, S_h – концентрация на верхней границе (в лагранжевой модели и соответствующих аналитических решениях $S_h = 0$).

Для случая, когда профиль K_s задаётся формулой (2.23), система (2.35) представляет собой линейное обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка с заданным граничным условием. Его решение имеет следующий вид:

$$s(z) = \left(S_h + \frac{H}{w_s} \right) \left(\frac{h}{z} \right)^{\frac{w_s}{u_* k}} - \frac{H}{w_s} \quad (2.36)$$

Для сопоставления этого решения с расчётами лагранжевой модели были выбраны частицы, имитирующие снежинки, поднятые с поверхности метелью, размером 100 мкм и плотностью 100 кг/м³. Скорость трения была задана равной $u_* = 0.5$ м/с. Важно отметить, что для обеспечения эквивалентности с постановкой из статьи [Wamser, Lykossov, 1995] (за исключением граничных условий), коэффициент сопротивления среды в лагранжевой модели задавался по формуле (2.6). Результаты численного моделирования и их сравнение с

аналитическим решением показаны на рисунке 2.8. Наблюдается практически идеальное совпадение профиля, рассчитанного лагранжевой моделью (чёрная кривая), и выведенного аналитического решения (красная кривая). Это свидетельствует о корректном и точном воспроизведении моделью переноса тяжёлых частиц, по крайней мере, в рамках применённых идеализированных условий. Для полноты картины на рисунке также показаны: решение из оригинальной статьи с иными граничными условиями (фиолетовая кривая) и аналитическое решение (2.36) для случая с ненулевой концентрацией на верхней границе (синяя кривая).

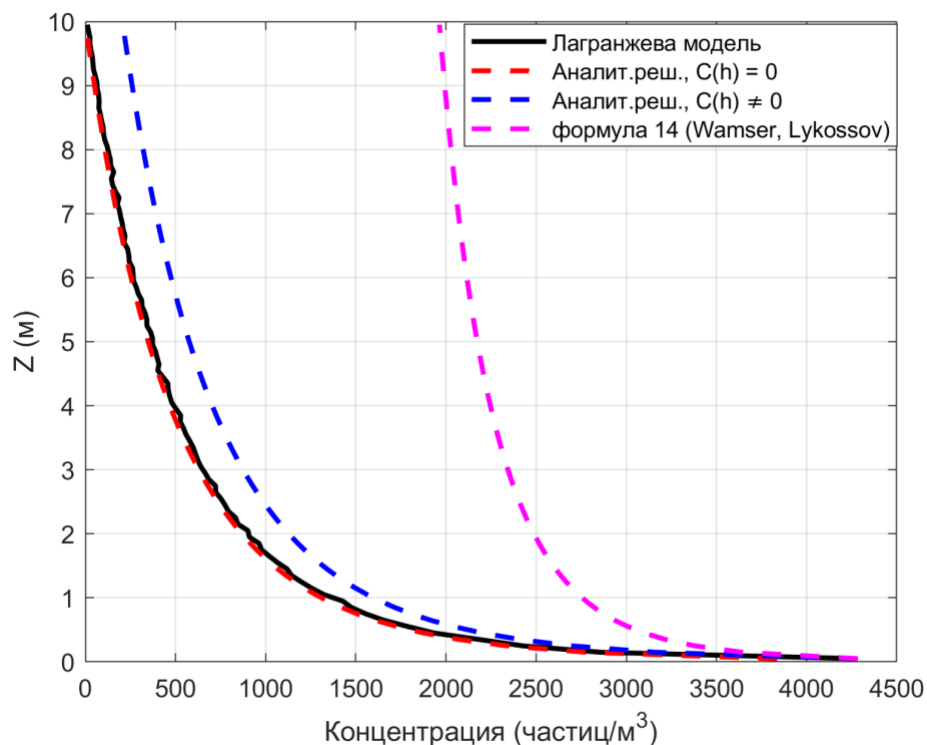


Рисунок 2.8. Профили концентрации крупных снежных частиц для условий пограничного слоя без учёта влияния частиц на стратификацию атмосферы.

В умеренных количествах крупные и тяжёлые аэрозоли часто присутствуют в окружающей среде. В таких условиях их перенос полностью определяется состоянием атмосферы, а обратное влияние самих частиц на поток пренебрежимо мало. Однако ощутимый эффект такого обратного влияния проявляется при очень высоких концентрациях, которые характерны для экстремальных явлений, таких как сильные метели или пыльные и песчаные бури. Чтобы расширить диапазон условий, для которых была проверена лагранжева модель, было выполнено её сравнение с аналитическими решениями, учитывающими обратное влияние концентрации частиц на плотностную стратификацию атмосферы. Теоретической основой для этого этапа верификации по-прежнему служит статья [Wamser, Lykossov, 1995].

Для учёта влияния концентрации на стратификацию в системе (2.35) профиль K_s был задан формулой (2.24). В этом случае система представляет собой нелинейное обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка с граничным условием. Полученное для него аналитическое решение имеет структуру, схожую с решением (2.36), однако обладает громоздкой формой из-за более сложного вида коэффициента турбулентной диффузии:

$$s(z) = \frac{\frac{e^{zHC_1/C_2}}{z^{u_*\kappa}} \frac{w_s}{z^{u_*\kappa}}}{\left(\frac{e^{hHC_1/C_2}}{\frac{w_s}{h^{u_*\kappa}} \left(S_h + \frac{H}{w_s} \right)} - f_1(z) + f_1(h) \right)} - \frac{H}{w_s}, \quad (2.37)$$

$$f_1(a) = \frac{u_*\kappa w_s C_1 e^{aHC_1/C_2} F(1, 1 - C_3/u_*\kappa, -aHC_1/C_2)}{C_2 C_3 a^{C_3/u_*\kappa}},$$

$$C_1 = g\beta w_s \sigma, \quad C_2 = u_*^4 (1 + \sigma S_r), \quad C_3 = w_s - u_*\kappa,$$

где S_r – концентрация на выбранной референсной высоте (может быть получена из профиля, рассчитанного лагранжевой моделью), β и σ – эмпирические константы, $F(a, b, c)$ – гипергеометрическая функция.

Параметры частиц и скорость трения в этом эксперименте были заданы так же, как и в предыдущем. В лагранжевой модели в начальный момент времени профиль K_s задавался по формуле (2.23). Затем на каждом шаге по времени вычислялись концентрации частиц, на основе которых пересчитывался профиль коэффициента диффузии по формуле (2.24).

Результаты данного сравнения приведены на рисунке 2.9. Для контекста на графике также показаны: решение из работы Вамзера и Лыковского с учётом влияния на стратификацию, но для других граничных условий (зелёная кривая), и решение для тех же граничных условий, но без учёта влияния частиц (фиолетовая кривая). Наблюдается почти идеальное соответствие между профилем, рассчитанным лагранжевой моделью (чёрная кривая), и выведенным аналитическим решением (красная кривая). Это подтверждает, что модель способна корректно оценивать влияние экстремально высоких концентраций частиц на плотностную стратификацию атмосферы.

Таким образом, в рамках двух описанных этапов была успешно проведена верификация модели на аналитических решениях для частиц различных масс и размеров в широком спектре идеализированных атмосферных условий.

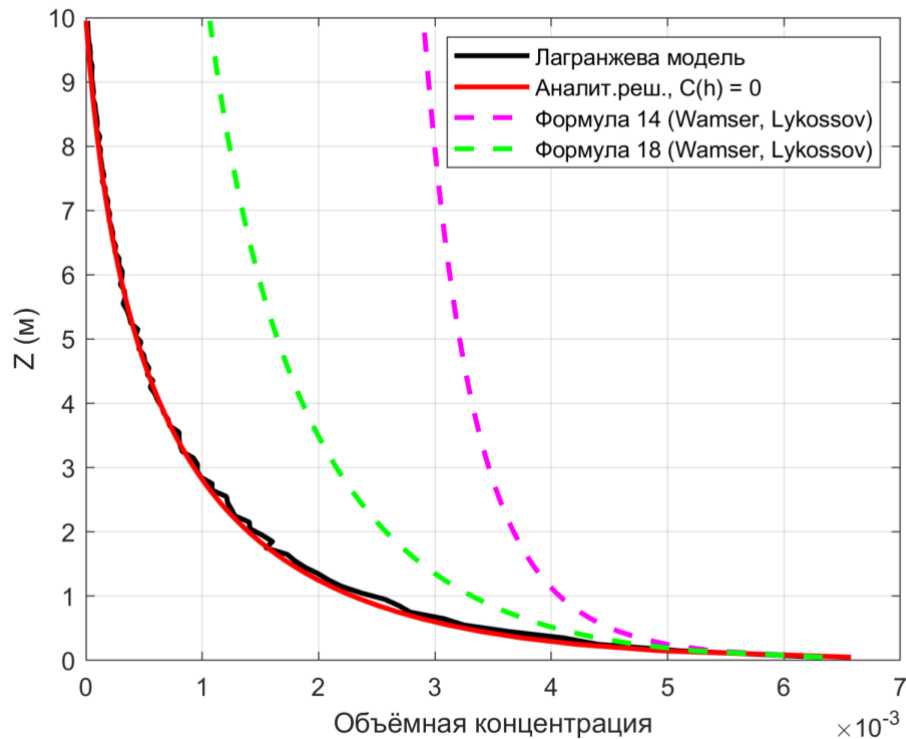


Рисунок 2.9. Профили концентрации крупных снежных частиц для условий пограничного слоя с учётом влияния концентраций частиц на стратификацию атмосферы.

2.8 Верификация модели на натуральных данных

Следующим шагом после верификации на идеализированных аналитических решениях является сравнение модели с данными реальных полевых наблюдений. Валидация по данным о реально измеренных в атмосфере концентрациях представляет собой один из наиболее обоснованных способов оценки точности модели. Однако проведение таких измерений сопряжено со значительными трудностями: требуется развёртывание большого количества приборов, обычно рассчитанных на узкий диапазон размеров частиц, синхронное измерение метеорологических величин на различных высотах и ожидание подходящих погодных условий. В то же время, данные регулярных стационарных наблюдений, например, на станциях контроля качества воздуха, как правило, не подходят для верификации пространственного распределения, так как измерения проводятся лишь в одной точке [Кульбачевский, 2021]. По этим причинам в научной литературе существует не так много комплексных наборов данных, включающих одновременно и вертикальные профили концентрации частиц, и сопутствующие метеорологические величины.

Для целей настоящей работы были использованы уникальные данные, представленные в монографии «Введение в экспериментальную метеорологию и климатологию песчаных бурь»

[Семёнов, 2020]. В этой книге обобщены результаты многолетних лабораторных и полевых исследований ветрового переноса пылевых и песчаных частиц. Экспедиции проводились на протяжении нескольких десятилетий в засушливых и пустынных районах (Аральское море, юго-восток Казахстана, п-ов Мангышлак и др.), что позволило собрать статистически богатый материал для широкого спектра метеорологических условий и частиц различных размеров и масс. В ходе кампаний измерялись скорость ветра (на высотах от 0.25 до 16 м), твёрдый расход песчаных частиц, температура воздуха и её градиент. Всего было получено более 1000 профилей скорости ветра и 140 профилей массы переносимого песка.

При этом непосредственно данные измерений расхода на разных высотах в книге приведены лишь для немногих случаев, в основном в качестве примеров для самых крупных частиц (размером более 120 мкм). Частицы такого размера перемещаются преимущественно за счёт механизма сальтации, который в модели не реализован. Для взвешенных частиц меньших размеров, представляющих основной интерес для данной работы, в книге приводятся аппроксимирующие формулы, описывающие зависимость твёрдого расхода и массовой концентрации от высоты. Эти формулы обобщают многочисленные, но не представленные в явном виде, данные измерений:

$$q(z) = q_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^{-0.57 \frac{w_g}{u_*}}, \quad (2.38)$$

$$C(z) = \frac{q(z)}{u(z)}, \quad (2.39)$$

где q – твёрдый расход песчаных частиц, z – высота над поверхностью, q_1 – твёрдый расход песчаных частиц на высоте z_1 , w_g – скорость оседания частиц, u_* – динамическая скорость, C – массовая концентрация частиц, u – скорость ветра. Автор монографии [Семёнов, 2020] также отмечает, что выражения (2.38) и (2.39) с поправкой на зависимость показателя степени от скорости оседания частиц соответствуют теоретическим формулам, ранее полученным для мелких пассивных частиц [Баренблатт, Голицын, 1973].

Для сопоставления лагранжевой модели с этими эмпирическими данными были выбраны два случая: со средним размером частиц 35 мкм (рис. 2.10а) и 50 мкм (рис. 2.10б). Согласно авторской классификации [Семёнов, 2020], первый тип частиц относится к алевроитам, а второй — к мелким фракциям песка. В обоих случаях плотность частиц принималась равной 2650 кг/м³, а динамическая скорость $u_* = 0.8$ м/с. Чтобы условия численного эксперимента соответствовали постановке, из которой выведены аппроксимирующие формулы, в лагранжевой модели были заданы следующие параметры: 10000 одинаковых частиц

одновременно выбрасывались вблизи поверхности; на нижней и верхней границах были установлены непроницаемые условия (упругий отскок), что эквивалентно нулевому потоку на границах. Расчёты проводились с двумя различными параметризациями турбулентности: моделью случайных смещений и моделью Ланжевена. Обратное влияние частиц на стратификацию не учитывалось.

Результаты сравнения показаны на рисунке 2.10. Для обоих типов частиц рассчитанные моделью профили в целом хорошо согласуются с эмпирическими. Небольшие расхождения могут быть обусловлены особенностями задания метеовеличин в аналитических формулах и в модели, а также тем, что эмпирическая формула (2.38) является лишь аппроксимацией измерений. Тем не менее, обе использованные параметризации смогли корректно воспроизвести общую форму профиля концентрации. В условиях ограниченности исходного набора метеоданных это можно считать успешной валидацией модели на натуральных данных.

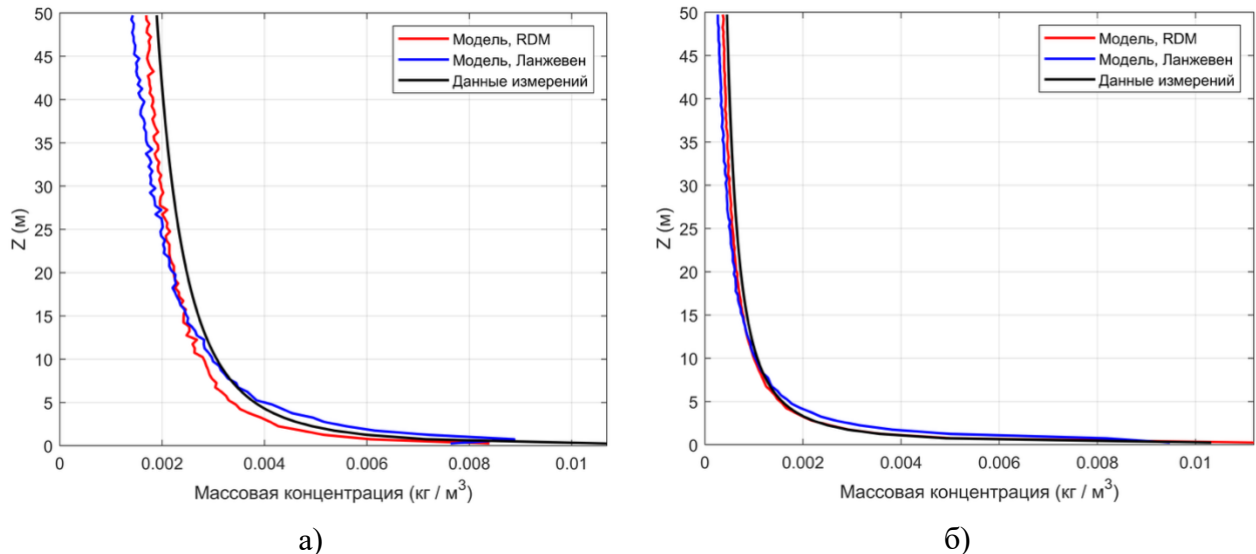


Рисунок 2.10. Вертикальные профили концентрации частиц по данным измерений и по результатам расчёта лагранжевой модели для частиц размером 35 мкм (а, пылевые) и 50 мкм (б, песчаные). RDM – модель случайных смещений (random displacement model).

2.9 Кросс-верификация по данным вихреразрешающего моделирования

Как было показано в предыдущих разделах, верификация на аналитических решениях и натуральных данных позволяет оценить базовую корректность работы модели, однако оба этих подхода имеют ограничения. Аналитические решения доступны лишь для сильно идеализированных условий, а натурные данные, как правило, неполны и содержат «шум» из-за множества неучтённых факторов. В связи с этим для более глубокой и контролируемой проверки работоспособности разработанной лагранжевой модели был применён метод

верификации на основе эталонной численной модели. В качестве эталонного решения в этом подходе использовались результаты расчётов вихреразрешающей (LES) модели ИВМ РАН [Варенцов и др., 2022]. LES-модель позволяет получить полный, согласованный и высокодетальный набор данных о турбулентном потоке и переносе примеси, выступая в роли «виртуальной лаборатории». Важно отметить, что сама LES-модель ИВМ РАН и её лагранжев блок были ранее отдельно верифицированы, в том числе и для задач переноса примесей в городских условиях, путём сравнения с лабораторными экспериментами [Glazunov, 2018], что подтверждает её пригодность в качестве эталона. Целью данной части исследования являлась проверка способности разработанной автономной стохастической лагранжевой модели (далее – АСЛМ), использующей на входе лишь осреднённые статистические характеристики турбулентности, воспроизводить результаты LES-моделирования.

Для проведения экспериментов была выбрана постановка, имитирующая городской пограничный слой атмосферы (ГПС). В LES-модели ИВМ РАН рассматривалась расчётная область размером $256 \times 128 \times 64$ м с шагом сетки 0.5 м, на нижней границе которой располагались периодически повторяющиеся препятствия, имитирующие регулярную городскую застройку (высота зданий $h = 16$ м, длина и ширина зданий $d = 16$ м), их конфигурация показана на рисунке 2.11.

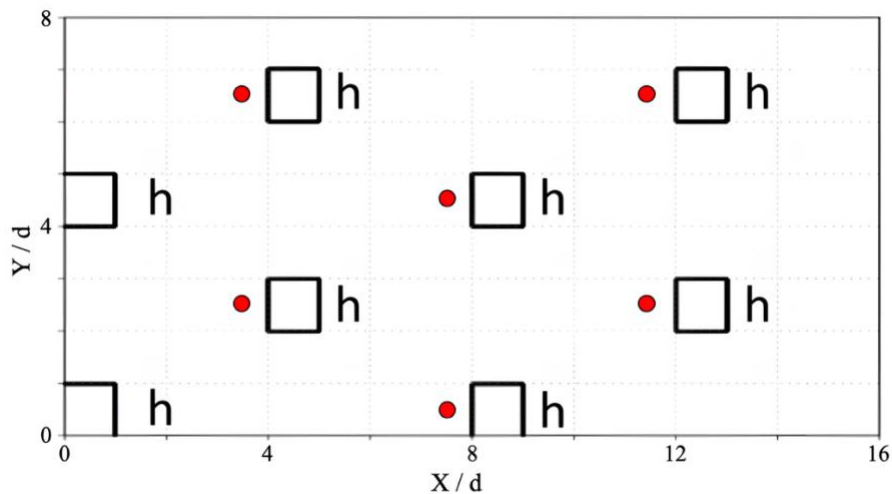


Рисунок 2.11. Конфигурация зданий (вид сверху с указанием высоты) и источников (красные точки) в численных экспериментах с LES-моделью. Высота зданий $h = 16$ м, длина и ширина зданий $d = 16$ м.

Было рассмотрено два сценария: нейтральная стратификация и устойчивая стратификация с параметром устойчивости $h/L = 0.75$ (при расчёте масштаба Обухова L концентрации частиц не учитывались), что соответствует сильному влиянию термической

стратификации на турбулентность. Подробное описание постановки экспериментов приведено в работах [Glazunov et al., 2021; Glazunov et al., 2022/2023). Внутри LES-модели параллельно с расчётом гидродинамики осуществлялся перенос огромного ансамбля лагранжевых частиц (40-60 млн одновременно), выбрасываемых из множества периодических точечных источников, расположенных на расстоянии $d/2$ слева от центра левой стены каждого здания (рис. 2.11). В одной серии экспериментов высота источников составила $h/16$ (1 метр над поверхностью земли), во второй серии – $1.5h$ (24 метра). Использование периодических граничных условий позволяло при обработке результатов расчётов осреднением свести эмиссию из множества источников к одному эффективному источнику и проследить формирование единого шлейфа на большом расстоянии. Именно эти результаты и принимались в качестве «эталона».

Для тестирования разработанной в настоящей работе АСЛМ из эталонных LES-расчётов были извлечены осреднённые по времени и горизонтالي (в пределах воздушного пространства между зданиями) вертикальные профили ключевых характеристик турбулентности: средней скорости ветра, дисперсий компонент скорости, скорости диссипации ТКЭ и коэффициента турбулентной диффузии. Эти профили служили единственными входными данными для АСЛМ. Важно отметить, что в дисперсии компонент скорости, извлечённые из LES-данных, включались не только нестационарные турбулентные флуктуации, но и пространственные вариации, обусловленные наличием стационарных вихрей вокруг зданий. Это было сделано для того, чтобы приближённо учесть турбулентные потоки организованными структурами, которые вносят существенный вклад в перенос примеси внутри ГПС. Далее в АСЛМ проводились расчёты переноса частиц при тех же условиях стратификации и с тем же расположением источников. В качестве стохастических параметризаций использовались три конфигурации, описанные ранее в разделе 2.2:

- Модель случайных смещений (RDM).
 - Простейшая ланжевенковская модель, не удовлетворяющая УХП (LSM0).
 - Ланжевенковская модель, удовлетворяющая УХП для вертикальной диффузии (LSM1).
- Во всех моделях первого порядка константа Колмогорова C_0 принималась равной 6.0, что соответствует её значению для инерционного интервала изотропной турбулентности.

Основная часть данной верификации заключалась в сравнении результатов, полученных упрощёнными ЛСМ, с эталонными данными LES. Сначала рассмотрим случай устойчивой стратификации. На рисунке 2.12 представлены поля приповерхностной концентрации для

точечного источника, расположенного над зданиями (высота $1.5h$, рис. 2.12а) и вблизи земли (высота $h/16$, рис. 2.12б) соответственно.

Визуальный анализ этих рисунков показывает, что модели RDM и LSM1 в целом корректно воспроизводят общую форму шлейфа и абсолютные значения концентрации. Модель LSM1 демонстрирует тенденцию к некоторому завышению концентрации, в то время как RDM даёт слегка заниженные значения. Эти небольшие расхождения могут быть связаны с особенностями интерполяции и экстраполяции входных данных LES вблизи поверхности [Glazunov et al., 2016]. В отличие от них, модель LSM0, не удовлетворяющая УХП, завышает приповерхностную концентрацию более чем на порядок, что сразу указывает на её неприменимость для такой постановки.

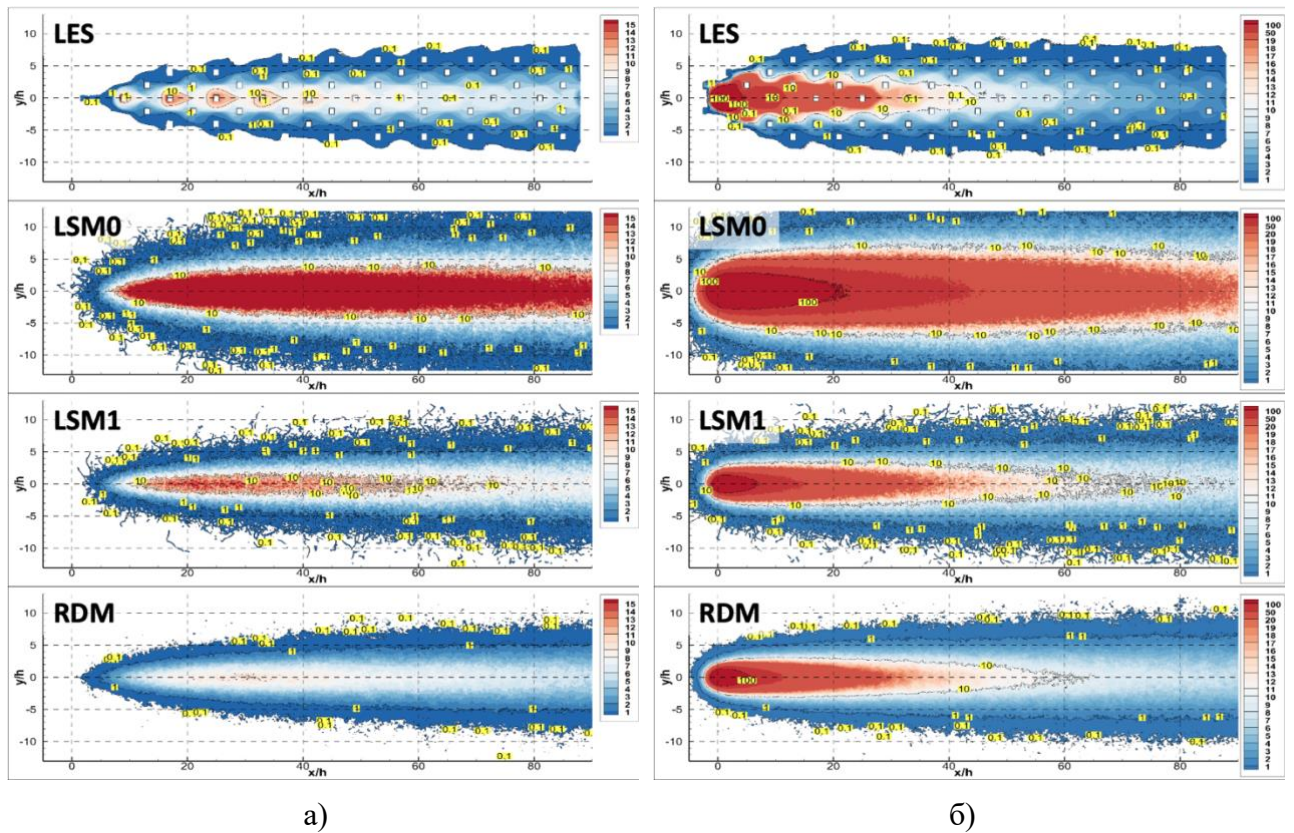
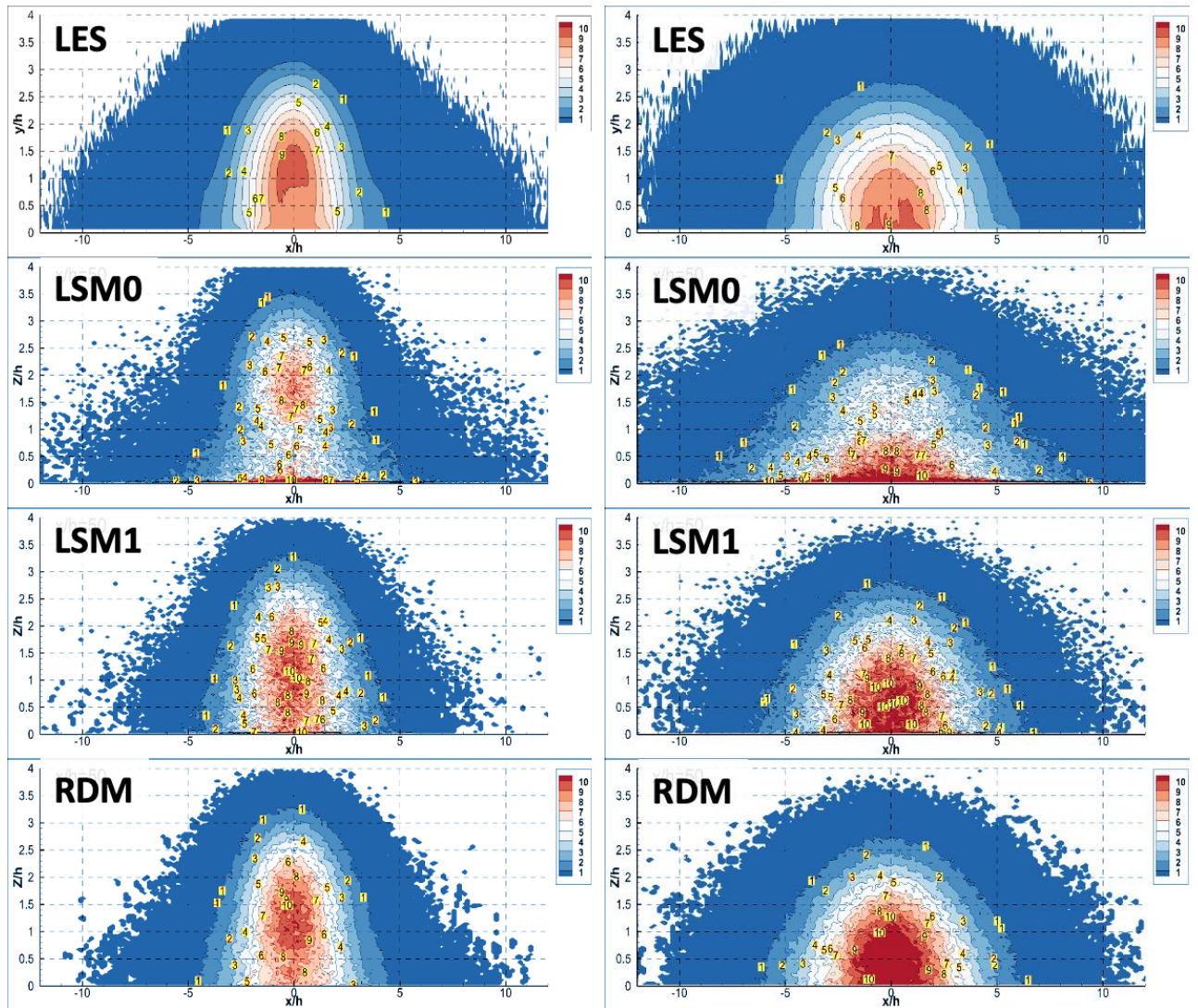


Рисунок 2.12. Поля приповерхностной нормированной концентрации частиц для точечного источника, расположенного над зданиями (а) и у земли (б), при устойчивой стратификации.

Более детальная картина видна на вертикальных срезах шлейфа на большом удалении от источника (800 м). Эти срезы, приведённые на рисунке 2.13, позволяют оценить качество воспроизведения вертикальной структуры шлейфа.

Модели LSM1 и RDM вновь показывают хорошее согласие с эталоном, правильно описывая вертикальное распределение примеси. Дефекты модели LSM0, наоборот,

проявляются особенно наглядно. Для высотного источника она приводит к нефизичному "раздвоению" шлейфа с образованием двух максимумов концентрации: одного над ГПС и второго у самой поверхности. Это можно интерпретировать как неспособность модели адекватно описать процесс вовлечения примеси из вышележащих слоёв в городской каньон. Для приповерхностного источника эта модель, напротив, препятствует выносу примеси из ГПС, что приводит к её ложному избыточному накоплению у земли.



а)

б)

Рисунок 2.13. Вертикальные срезы нормированной (на скорость трения, высоту зданий и суммарную интенсивность источников) концентрации частиц на удалении 800 м от источника, расположенного над зданиями (а) и у земли (б), при устойчивой стратификации.

Интересно отметить, что в условиях ГПС ошибки LSM0 оказываются более существенными, чем при моделировании над плоской поверхностью [Glazunov et al., 2016], что

подчёркивает важность использования теоретически корректных моделей в условиях неоднородной турбулентности.

Далее рассмотрим случай нейтральной стратификации. Результаты лагранжева моделирования и их сравнение с LES представлены на рисунке 2.14. В целом, выводы для нейтрально-стратифицированного ГПС аналогичны тем, что были сделаны для устойчивого случая: модели RDM и LSM1 показывают хорошее согласие с эталоном, а LSM0 демонстрирует значительные ошибки. Однако здесь проявляется одна важная деталь, отличающая этот случай от устойчивого. В отличие от устойчивой стратификации, при нейтральной обе "хорошие" модели (LSM1 и RDM) систематически завышают концентрацию примеси в шлейфе на дальних расстояниях от источника примерно в 1.5 раза, при этом корректно моделируя ширину шлейфа.

Такое поведение свидетельствует о том, что при нейтральной стратификации обе модели с константой $C_0 = 6.0$, правильно воспроизводя горизонтальную диффузию, обеспечивают недостаточное вертикальное перемешивание. Причина этого расхождения кроется в физике турбулентных течений. Значение $C_0 = 6.0$ соответствует изотропной турбулентности. Однако при нейтральной стратификации в пограничном слое (помимо мелкомасштабных флуктуаций) существуют крупные упорядоченные структуры (например, валикообразные вихри), которые вносят значительный вклад в вертикальный перенос. В LES-модели эти структуры разрешаются явным образом, в то время как стохастические модели, подобные рассмотренным, не способны их воспроизвести на основе осреднённых одномерных входных данных. При устойчивой стратификации эти крупные структуры подавляются, и согласие моделей улучшается. Этот результат указывает на границы применимости использованных стохастических моделей в подобных квазиодномерных постановках (без трёхмерных полей и явного воспроизведения застройки в лагранжевой модели).

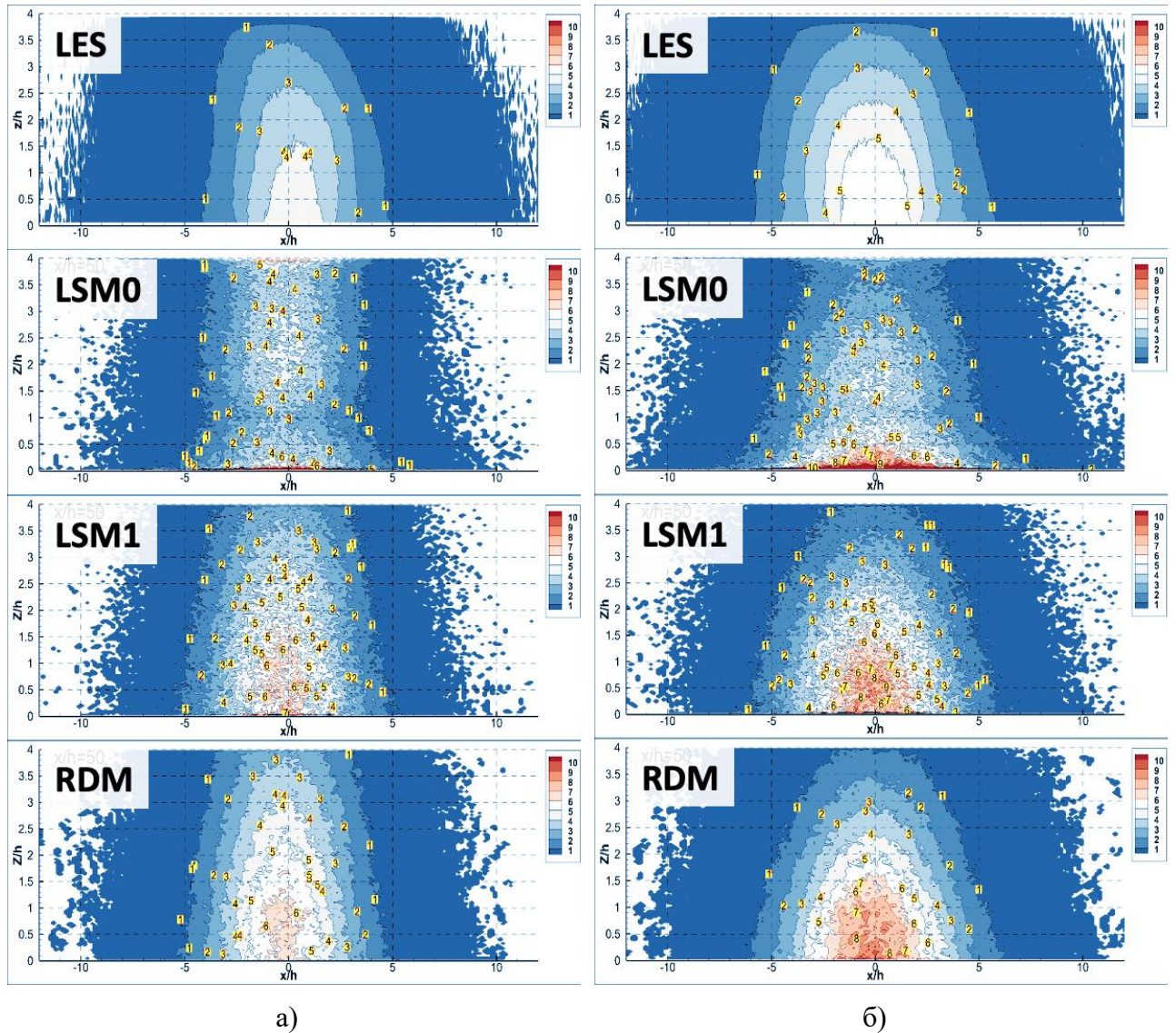


Рисунок 2.14. Вертикальные срезы нормированной концентрации частиц на удалении 800 м от источника, расположенного над зданиями (а) и у земли (б), при нейтральной стратификации.

Наконец, сравнение дисперсии шлейфа в поперечном направлении (рис. 2.16), которая характеризует его ширину, подтверждает сделанные выводы: модели LSM1 и RDM очень точно описывают этот параметр, в то время как LSM0 даёт завышенные значения, особенно при устойчивой стратификации, что коррелирует с обнаруженным ранее избыточным перемешиванием.

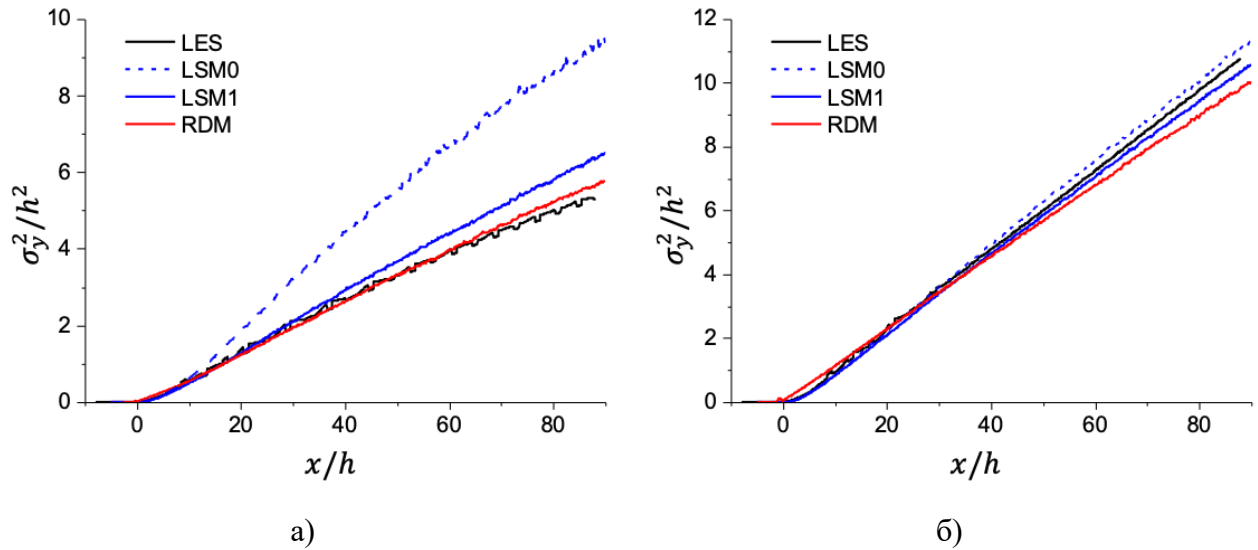


Рисунок 2.15. Нормированная дисперсия координат частиц в направлении y (перпендикулярном направлению ветра) в зависимости от расстояния до источника над зданиями при устойчивой (а) и нейтральной (б) стратификации.

По результатам проведённой кросс-верификации можно сделать следующие ключевые выводы.

Во-первых, стохастические лагранжевы модели, разработанные в рамках данной работы, способны в целом корректно воспроизводить особенности распространения примеси в сложном турбулентном поле городского пограничного слоя в автономном режиме при условии адекватного задания осреднённых статистических характеристик турбулентности. Это открывает перспективу их использования в связке с данными наблюдений или простых RANS-моделей для практических расчётов.

Во-вторых, верификация показала критическую важность использования теоретически обоснованных моделей, удовлетворяющих УХП. Простейшая модель Ланжевена (LSM0), не удовлетворяющая этому условию, может в определённых условиях приводить к грубым качественным и количественным ошибкам в распределении концентрации, что делает её малоприменимой для использования в задачах с неоднородной турбулентностью.

В-третьих, модель случайных смещений (RDM) и модель Ланжевена с поправкой на УХП (LSM1) показали очень близкие результаты, хорошо согласующиеся с эталонными LES-данными, особенно в условиях устойчивой стратификации. Это свидетельствует о справедливости диффузионного приближения для описания переноса пассивной примеси на достаточно больших расстояниях от источника и подтверждает корректность физических основ и реализации обеих параметризаций в разработанной модели.

Проведённая кросс-верификация подтвердила надёжность и физическую обоснованность разработанного инструментария для последующего применения в исследовательских задачах, описанных в следующих главах диссертации. Важно подчеркнуть, что данное сравнение проводилось в наиболее жёстких для АЛСМ условиях: на вход модели подавались лишь одномерные (осреднённые по времени и горизонтали) вертикальные профили метеорологических характеристик. Вся сложнейшая трёхмерная структура течения внутри городского слоя, включая стационарные вихри и нестационарные когерентные структуры, была представлена в виде осреднённых статистик. Несмотря на столь кардинальное упрощение входной информации, разработанная модель продемонстрировала высокую точность в воспроизведении интегральных характеристик переноса. Можно с высокой степенью уверенности предположить, что при использовании более полных и детальных входных данных точность расчётов возрастет, а выявленные расхождения будут менее выражены. Это подтверждает высокий потенциал модели как для использования в связке с моделями разного уровня сложности, так и для прямого применения в прикладных задачах.

2.10 Интегрированный модуль лагранжева переноса для вихреразрешающей модели НИВЦ МГУ

Как было показано в предыдущих разделах, разработанная лагранжева модель способна эффективно функционировать в автономном режиме. В ходе работы был накоплен опыт её использования с данными от различных гидродинамических моделей, включая RANS-модель ENVI-met [Варенцов, 2019], а также с осреднёнными данными, полученными из расчётов LES-моделей ИВМ РАН (см. раздел 2.5) и НИВЦ МГУ (одиночные тесты, не упомянутые ранее в данной работе). Для перехода к следующему, более высокому уровню детализации моделирования, особенно в задачах переноса примеси в городской среде, требуется доступ к максимально детальным по пространству и времени полям метеорологических величин.

Оптимальным источником таких данных на сегодняшний день являются вихреразрешающие (LES) модели. Они позволяют явным образом воспроизводить широкий спектр турбулентных вихрей, от крупных, сопоставимых с размером зданий, до мелкомасштабных, что критически важно для корректного описания траекторий аэрозольных частиц. Однако, несмотря на очевидные преимущества, работа с данными LES в автономном режиме сопряжена с фундаментальной технической проблемой: огромным объёмом генерируемых данных. Сохранение полной четырёхмерной информации о потоке с высоким

временным и пространственным разрешением для последующей обработки практически невозможно с точки зрения дискового пространства и скорости ввода-вывода.

В связи с этим, наиболее эффективным и перспективным решением является непосредственная интеграция лагранжева программного кода в виде модуля в LES-модель. Такой подход позволяет получить прямой доступ к мгновенным полям метеовеличин "на лету", в ходе гидродинамического расчёта, минуя необходимость их промежуточного вывода и хранения. Это открывает доступ к широкому спектру явно разрешённых турбулентных флуктуаций и позволяет, с одной стороны, более точно оценивать перенос частиц в условиях сложных городских течений, с другой – учитывать и исследовать тонкие физические эффекты, такие как влияние инерции частиц на их взаимодействие с турбулентными структурами разного масштаба [Глазунов, 2018; Huilier, 2021].

Именно поэтому следующим логическим шагом развития стала интеграция разработанного лагранжева кода в качестве модуля в LES-модель, созданную совместно в **НИВЦ МГУ** и **ИВМ РАН** (далее используется сокращение – LES-модель НМИР или модель НМИР, называемая так в данной работе по первым буквам организаций, в которых модель была создана). В качестве основного инструмента для расчёта гидродинамических полей в следующих главах данной работы использовалась LES-конфигурация этой модели. Она основана на едином гидродинамическом коде, который объединяет подходы LES, DNS и RANS для моделирования геофизических турбулентных течений с высоким пространственным разрешением [Mortikov et al., 2019; Kadantsev et al., 2021; Tkachenko et al., 2022; Debolskiy et al., 2023, Suiazova et al., 2024].

LES-модель НМИР рассчитывает динамику термически стратифицированной жидкости, которая описывается фильтрованными уравнениями Навье-Стокса в приближении Буссинеска. Для параметризации подсеточного тензора напряжений используется модель турбулентной вязкости Смагоринского, в которой коэффициент Смагоринского и подсеточное число Прандтля (зависящие от времени и пространственных координат) определяются с помощью динамической процедуры [Germano et al., 1991]. Численная модель использует консервативные конечно-разностные схемы второго порядка точности для пространственной аппроксимации на прямоугольных сетках. Для интегрирования уравнений движения и непрерывности по времени и для обеспечения условия несжимаемости применяется метод дробных шагов, а для аппроксимации уравнений для импульса и тепла – явная схема Адамса-Бэшфорта третьего порядка. Важной особенностью модели является возможность явного представления зданий и растительности, причём поверхность каждого здания может иметь индивидуально заданные

параметры (шероховатость, температура, потоки тепла и влаги и др.), что позволяет моделировать сложные городские сценарии с разнообразной застройкой [Tarasova et al., 2024].

Процесс интеграции был взаимовыгодным для обоих программных комплексов. С одной стороны, модель НМИР на тот момент уже содержала базовую возможность моделирования лагранжевых частиц, однако она была реализована в упрощённом виде: не учитывалось стохастическое влияние подсеточной турбулентности, отсутствовали механизмы для обработки взаимодействия частиц с твёрдыми поверхностями и их осаждения, а также не было возможности одновременного моделирования нескольких типов частиц в одном расчёте. Таким образом, внедрение разработанного модуля позволило обогатить модель НМИР физически полным и гибким инструментарием для моделирования переноса частиц.

Для обеспечения модульности, гибкости и возможности независимой разработки итоговая программная архитектура лагранжева блока была спроектирована как трёхуровневая система:

- **Уровень 1: Ядро LES-модели НМИР.** Это основной программный код LES-модели, отвечающий за гидродинамические расчёты. На этом уровне хранятся и обновляются основные термогидродинамические поля. Из ядра модели происходит вызов функций следующего уровня, отвечающих за обмен информацией с лагранжевым блоком.
- **Уровень 2: Модуль лагранжева переноса «ptcl».** Этот модуль является опциональным компонентом, который может быть деактивирован, если расчёт переноса частиц не требуется. В нём инкапсулирована вся информация о частицах и их характеристиках (положение, скорость, тип и т.д.), а также происходит выполнение большинства связанных с ними расчётов. На каждой итерации основного цикла из ядра модели в модуль ptcl поступает широкий спектр информации, включая мгновенные поля метеовеличин. В обратном направлении могут быть переданы рассчитанные поля концентрации и данные об осаждении частиц. Внутри данного модуля реализована инфраструктурная основа и набор базовых алгоритмов, в то время как более сложные и специфические методы вынесены на следующий уровень.
- **Уровень 3: Внешние подключаемые библиотеки «ptcl-ext».** Для максимальной гибкости и расширяемости предусмотрена возможность подключения внешних библиотек. Из них могут вызываться функции для решения специфических задач: расчёта перемещения частиц с учётом различных стохастических параметризаций или обработки сложных сценариев столкновений с поверхностями. Преимущество такого подхода заключается в том, что библиотеки и функции на этом уровне проще всего

изменять или создавать самостоятельно, расширяя функционал модели без необходимости вносить изменения в её ядро.

Такая трёхуровневая архитектура, основанная на стандартизированных интерфейсах (наборах переменных и вызовов функций) для обмена данными между уровнями, позволила не просто «встроить» один код в другой, а создать гибкую и расширяемую систему для дальнейших исследований.

В процессе внедрения в код LES-модели НМИР разработанный лагранжев код был адаптирован под новую программную инфраструктуру. Для этого из исходной автономной версии были отобраны наиболее важные и вычислительно эффективные параметризации. В итоге в составе интегрированного модуля были реализованы:

- Лагранжевы уравнения движения для частиц, решаемые при помощи явной схемы Эйлера первого порядка для смещения (2.27) либо явной схемы Эйлера первого порядка для скорости и полунеявной схемы Кранка-Николсон для координаты (уравнения (2.28)–(2.29)).
- Две альтернативные параметризации для силы сопротивления среды: универсальная для сферических частиц (2.3) и упрощенная на основе закона Стокса (2.6).
- Две стохастические модели для учёта подсеточной турбулентности: модель случайных смещений (RDM, ур. (2.14)) и простая модель Ланжевена (LSM0, ур. (2.19)). Более сложная модель LSM1 на данном этапе не была реализована из-за трудностей с расчётом в LES-модели НМИР необходимых для неё входных параметров в реальном времени.
- Параметризация распада частиц с ограниченным временем жизни.
- Параметризация взаимодействия частиц со зданиями по типу «сеточная геометрия», поскольку в LES-модели НМИР здания также представлены набором непроницаемых ячеек расчётной сетки.

Управление параметрами лагранжева модуля, включая эмиссию и стоки частиц, производится централизованно через общий конфигурационный файл LES-модели НМИР, в специально выделенном сегменте с названием `ptcl`. Такая организация позволяет пользователю гибко настраивать численный эксперимент, не внося изменений в исходный код.

В сегменте `ptcl` задаются как общие параметры для частиц (например, значение ускорения свободного падения), так и ключевые настройки режима моделирования. Пользователь может выбрать режим переноса частиц: активный, с полным учётом инерции и стохастических эффектов, или пассивный, где частицы движутся как идеальные трассеры, следуя за потоком.

В случае с активным режимом можно выбрать стохастическую модель. Также в конфигурационном файле детально описываются источники (их количество, геометрия, режим эмиссии и интенсивность) и стоки (положение и геометрия поглощающих и/или разрешённых областей).

Ключевой особенностью модуля является возможность одновременного моделирования переноса нескольких типов частиц в одном расчёте. Число типов и их индивидуальные характеристики задаются в конфигурационном файле. Для каждого типа частиц могут быть определены свои уникальные физические свойства, такие как диаметр, плотность материала, а также вероятности осаждения, задаваемые отдельно для горизонтальных (земля, крыши) и вертикальных (стены) поверхностей. Кроме того, для моделирования биоаэрозолей или радиоактивных частиц для каждого типа может быть указана своя скорость распада. Это позволяет в рамках одного численного эксперимента исследовать, как частицы разного размера, плотности и «живучести» ведут себя в одних и тех же турбулентных условиях.

Итоговый алгоритм работы лагранжева модуля в LES-модели НМИР представлен на рисунке 2.16.

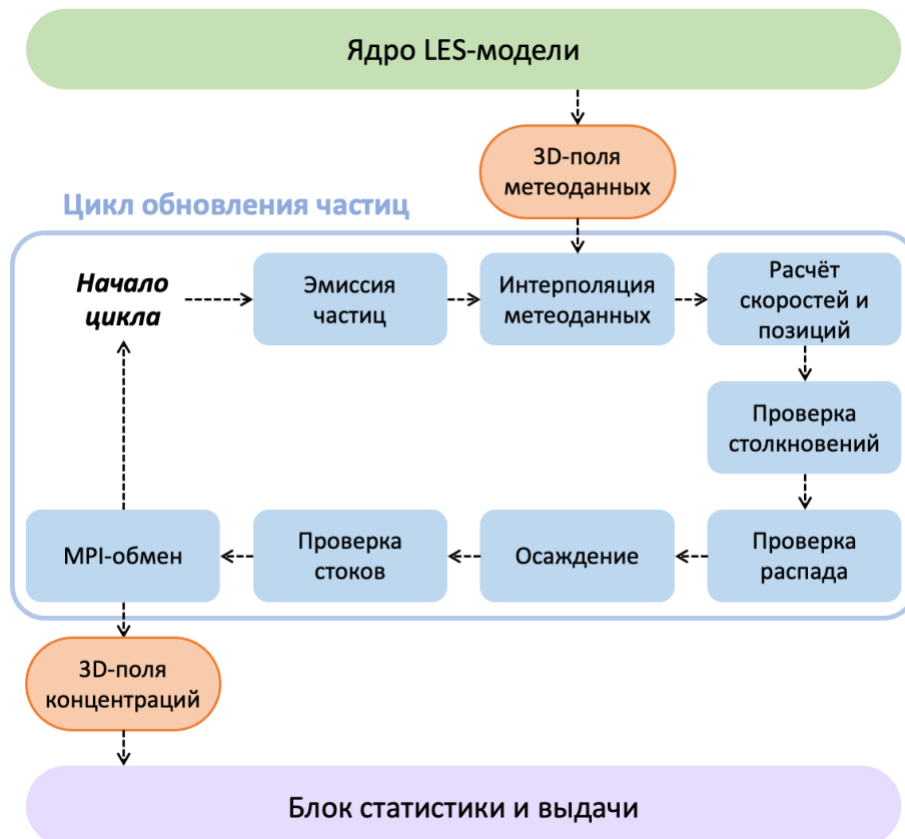


Рисунок 2.16. Алгоритм работы модуля лагранжева переноса частиц в модели НМИР.

В зависимости от настроек в конфигурационном файле выходная информация о частицах может быть представлена в форматах концентрации на сетке и/или списка частиц с указанием позиции каждой. Для формата концентраций доступен вывод как мгновенных полей, так и осреднённых по времени за указанный период. Также могут быть выведены как трёхмерные поля, так и их осреднения вдоль одной или нескольких пространственных осей (например, вертикальные профили). Данные об осаждении частиц на поверхности агрегируются в ячейках сетки и могут быть выведены в формате накопленных концентраций осаждённых частиц как трёхмерные поля (аналогично обычным концентрациям).

2.11 Заключение к главе 2

В настоящей главе был представлен разработанный в рамках диссертационного исследования программный комплекс для моделирования переноса и осаждения аэрозольных частиц, основанный на лагранжевом подходе. Были подробно описаны его физико-математические основы, реализованные параметризации, численные схемы и архитектура программного кода как в автономном режиме, так и в виде интегрированного модуля для вихреразрешающей модели НИВЦ МГУ. Проведённая всесторонняя верификация показала высокую надёжность и физическую обоснованность созданного инструмента. Вместе с тем, как и любая численная модель, он имеет ряд допущений и ограничений, которые важно очертить.

Ключевые допущения модели:

- **Физические процессы.** В текущей версии модели не учитываются такие важные процессы, как коагуляция частиц, их фазовые переходы (испарение, конденсация), химические реакции и влажное осаждение. Кроме того, не реализован механизм сальтации, что ограничивает применение модели для описания переноса очень крупных частиц (песка) в приповерхностном слое при сильном ветре.
- **Взаимодействие частиц.** Модель не учитывает прямые столкновения между частицами, а также их обратное влияние на поля скорости и температуры, за исключением специализированной параметризации для случаев экстремально высоких концентраций. Это допущение является стандартным для большинства задач по переносу аэрозолей в атмосфере, однако может быть не вполне корректным для моделирования плотных двухфазных потоков.
- **Ограничения параметризаций.** Каждая из реализованных параметризаций имеет свои границы применимости. В частности, проведённая верификация показала, что

используемые стохастические модели, основанные на одноточечной статистике, могут занижать интенсивность вертикального перемешивания при нейтральной стратификации из-за неучёта крупных когерентных структур течения.

Эти ограничения одновременно являются и перспективами дальнейшего развития модели. Внедрение параметризаций для влажного осаждения и базовых химических превращений, реализация более сложных стохастических моделей, учитывающих пространственную структуру турбулентности, а также разработка двусторонней связи между частицами и потоком – всё это представляет собой логичные шаги по совершенствованию созданного инструмента.

В заключение, основным результатом работы, представленной в данной главе, является создание, всесторонняя верификация и интеграция в LES-модель мощного и гибкого инструмента для исследования переноса частиц. Модель была успешно проверена на аналитических решениях для широкого спектра условий: от пассивных до инерционных частиц, от низких до экстремально высоких концентраций. Продемонстрировано хорошее согласие с данными натурных измерений переноса пылевых частиц в условиях песчаных бурь. Наконец, проведена кросс-верификация по данным вихререзающего моделирования, которая подтвердила корректность физических основ модели и выявила границы применимости используемых стохастических подходов.

Таким образом, созданный и проверенный инструментарий позволяет с высокой степенью достоверности решать сложные научные задачи. Именно с помощью этого инструмента в последующих главах диссертации получены новые научные результаты, связанные с изучением особенностей переноса частиц в реалистичных городских условиях.

Полученные в этой главе результаты позволяют сформулировать следующее защищаемое положение:

Разработанная лагранжева модель переноса и осаждения аэрозолей, сопряжённая с вихререзающей моделью пограничного слоя атмосферы, верифицирована и позволяет воспроизводить детальную пространственную структуру полей концентрации и осаждения частиц в городской застройке.

Глава 3. Моделирование переноса аэрозолей в разных типах городской застройки на основе классификации ЛКЗ

В данной главе на основе вихреразрешающего (LES) моделирования с лагранжевым модулем переноса частиц анализируется, как геометрия городской застройки определяет структуру воздушного течения и пространственное распределение аэрозолей в городском пологе. Исследование построено на серии численных экспериментов для четырёх типов локальных климатических зон (ЛКЗ), наиболее распространённых в условиях Москвы. Сначала рассматриваются вопросы создания карт высот городской застройки и постановки численных экспериментов, затем – результаты анализа модельных расчётов: структура воздушного потока, пространственное распределение концентрации и чувствительность полученных закономерностей к свойствам частиц. Ключевой задачей являлась оценка влияния морфологии и морфометрических параметров застройки на перенос аэрозолей и оценка применимости ЛКЗ для описания его особенностей, то есть в качестве предиктора в задачах аэрозольного загрязнения и качества воздуха.

3.1 Конфигурации городской застройки

Классификация локальных климатических зон (Local Climate Zones, LCZ), предложенная Стюартом и Оке [Stewart, Oke, 2012], является сегодня фактическим стандартом описания городской поверхности в задачах городской климатологии. В ней поверхность разбивается на 17 классов (10 застроенных и 7 природных), каждый из которых задаётся фиксированным диапазоном морфометрических, термических и радиационных параметров: средней высоты зданий \bar{H} , плотности застройки λ_p , отношения аспекта городского каньона, доли непроницаемой поверхности и др. ЛКЗ задаются как локально однородные участки масштаба сотен метров – первых километров и применяются как для классификации городской ткани, так и в качестве унифицированных входных данных при моделировании городского пограничного слоя [Bechtel et al., 2015; Demuzere et al., 2022]. В последние годы ЛКЗ всё чаще используются и в задачах, связанных с качеством воздуха [Amouei, 2023; Gál et al., 2025], однако объём работ, в которых классификация ЛКЗ систематически проверялась бы как предиктор переноса аэрозолей, остаётся ограниченным, что и мотивирует выбор именно этой классификации в настоящем исследовании.

Выбор конкретных типов ЛКЗ для исследования в данной работе основан на их распространённости в Москве, поскольку планировалось рассматривать в том числе реальные конфигурации застройки из разных частей города. На рис. 3.1 приведены карты типов ЛКЗ для

Москвы и Подмосковья в пределах 50 и 20 км от центра Москвы. Карты построены на основе региональной карты ЛКЗ [Varentsov et al., 2020], созданной по открытым данным из разных источников специально для моделирования Московского региона в мезомасштабной метеорологической модели COSMO; разрешение карты составляет 100 м. Визуально внутри МКАД доминирует ЛКЗ 4 (открытая многоэтажная застройка), а на территории области – ЛКЗ 6 (открытая малоэтажная), при этом в целом по карта неоднородная, разные типы ЛКЗ постоянно сменяют друг друга как в городе, так и в области.

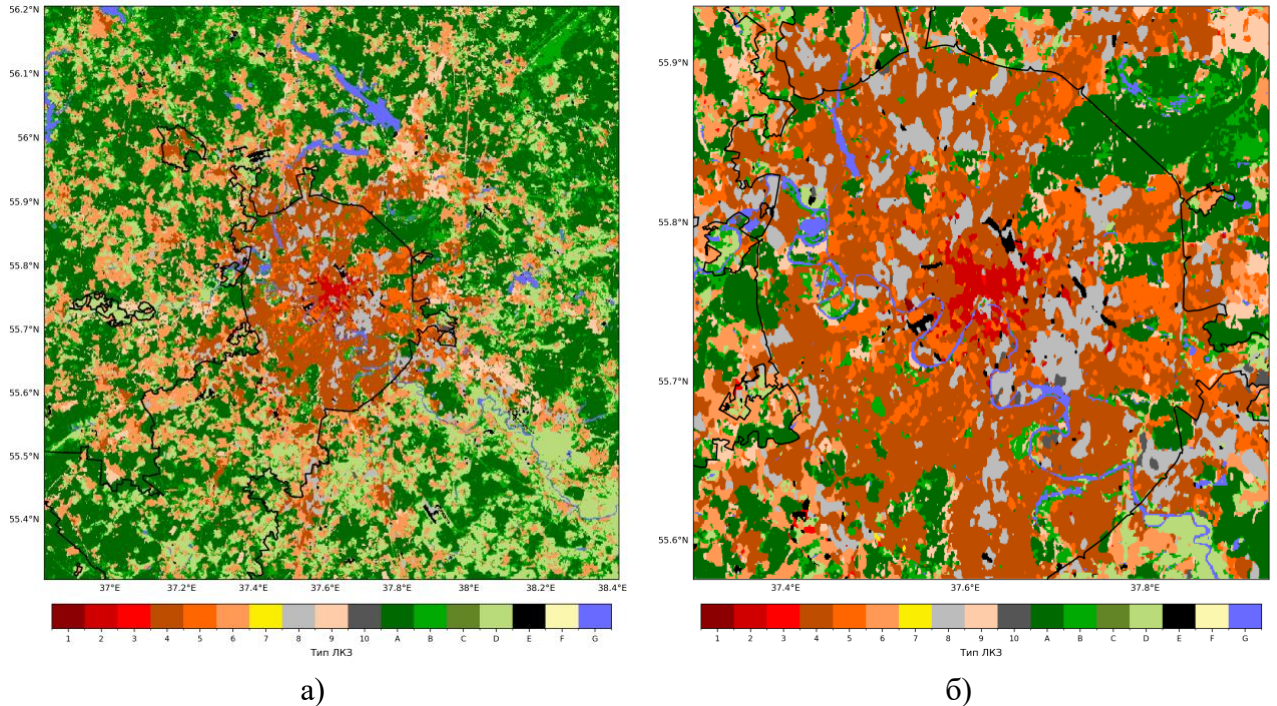


Рисунок 3.1. Карты типов ЛКЗ для территории Москвы и Московской области в пределах 50 км (а) и 20 км (б) от центра Москвы. Карта построена на основе данных региональной карты ЛКЗ для Москвы и окрестностей [Varentsov et al., 2020].

В табл. 3.1 представлены описания всех застроенных (урбанизированных) типов ЛКЗ, их основные геометрические параметры и распространённость в Москве – площадь и доля среди застроенных территорий. Геометрические параметры взяты из определений и табличных значений для ЛКЗ [Stewart, Oke, 2012], а данные о распространённости в Москве рассчитаны по упомянутой выше региональной карте ЛКЗ [Varentsov et al., 2020]. В пределах Москвы преобладает ЛКЗ 4 – почти половина застроенной территории (43.74%). Значимую долю занимают также ЛКЗ 5 (10.06%) и ЛКЗ 6 (26.35%), причём последняя в основном представлена в пригородах и области, а её большая доля в статистике по Москве обеспечивается за счёт Новой Москвы – в пределах МКАД она распространена существенно слабее. ЛКЗ 2 на масштабе всего города даёт лишь около 2% застроенной площади, однако в радиусе 5 км от

центра, что примерно соответствует территории внутри Третьего транспортного кольца, на этот тип приходится более четверти застройки. Заметную долю (11.41%) занимает также ЛКЗ 8 – крупногабаритная малоэтажная застройка, объединяющая промышленность, склады и логистические объекты.

Для дальнейшего исследования выбраны четыре типа: ЛКЗ 2, ЛКЗ 4, ЛКЗ 5 и ЛКЗ 6. С одной стороны, это наиболее распространённые в Москве типы застройки, в которых при этом постоянно живут и перемещаются люди, что определяет первоочередную значимость задач качества воздуха для них. ЛКЗ 8, при сопоставимой по доле площади, в настоящей работе не рассматривается, поскольку территории её распространения (промышленные и логистические зоны) не являются местами постоянного пребывания населения, а ограниченный размер выборки конфигураций мотивирует фокусироваться на жилой и общественно-деловой застройке. С другой стороны, выбранные четыре типа охватывают сразу две независимые оси изменчивости геометрии: по средней высоте зданий (ЛКЗ 4 – высокая, ЛКЗ 5 – средняя, ЛКЗ 6 – малоэтажная) и по плотности застройки (ЛКЗ 2 – плотная, ЛКЗ 4-6 – открытые), что позволяет в дальнейшем разделять эффекты высотности и плотности.

Краткая характеристика выбранных типов застройки с типичными для них примерами в Москве:

- ЛКЗ 2 – плотная среднеэтажная застройка, характерная для исторической и в целом центральной части города;
- ЛКЗ 4 – открытая высотная застройка, типичная для позднесоветской плановой застройки, современных микрорайонов многоэтажного жилья и деловых кварталов;
- ЛКЗ 5 – открытая среднеэтажная (до 5-8 этажей) застройка, объединяющая жилые районы панельной и блочной застройки 20-го века;
- ЛКЗ 6 – открытая малоэтажная застройка, характерная для пригородов и Новой Москвы, зачастую состоит из отдельных частных домов.

Чтобы оценить влияние ЛКЗ на перенос аэрозолей в реалистичной городской среде, для каждого из четырёх выбранных типов экспертным образом было отобрано по 5 реальных локаций в Москве и Подмосковье – итого 20 площадок. Поиск локаций вёлся по совокупности данных региональной карты ЛКЗ [Varentsov et al., 2020] и более свежей, но из-за особенностей фильтрации более шумной глобальной карты ЛКЗ [Demuzere et al., 2022]: отбирались участки, территория вокруг которых в радиусе нескольких сотен метров устойчиво относилась к выбранному типу ЛКЗ; на этапе построения карт высот для каждой локации дополнительно

выполнялась проверка соответствия фактических морфометрических параметров табличному диапазону данного типа ЛКЗ. По возможности локации подбирались из разных частей города, чтобы охватить максимум разнообразия городской застройки.

Таблица 3.1. Параметры локальных климатических зон (ЛКЗ): геометрические характеристики и распространённость в Москве. Данные представлены только для застроенных (урбанизированных) типов ЛКЗ, получены на основе определений ЛКЗ [Stewart, Oke, 2012] и региональной карты ЛКЗ для Москвы и окрестностей [Varentsov et al., 2020]. Зелёным выделены типы ЛКЗ, исследуемые далее в работе.

Номер и описание ЛКЗ	Средняя высота зданий, м	Доля застроенной площади, %	Отношение аспекта городского каньона	Площадь в границах Москвы, км ²	Доля среди застроенных территорий в границах Москвы, %
ЛКЗ 1, компактная высокоэтажная застройка	> 25	40 – 60	> 2	1	0.06
ЛКЗ 2, компактная среднеэтажная застройка	10 – 25	40 – 70	0.75 – 2	23	1.98 (28% в радиусе 5 км от центра)
ЛКЗ 3, компактная малоэтажная застройка	3 – 10	40 – 70	0.75 – 1.5	3	0.29
ЛКЗ 4, открытая высокоэтажная застройка	> 25	20 – 40	0.75 – 1.25	514	43.74
ЛКЗ 5, открытая среднеэтажная застройка	10 – 25	20 – 40	0.3 – 0.75	118	10.06
ЛКЗ 6, открытая малоэтажная застройка	3 – 10	20 – 40	0.3 – 0.75	310	26.35
ЛКЗ 7, облегчённая малоэтажная застройка	2 – 4	60 – 90	1 – 2	1	0.07
ЛКЗ 8, крупногабаритная малоэтажная застройка	3 – 10	30 – 50	0.1 – 0.3	134	11.41
ЛКЗ 9, рассеянная застройка	3 – 10	10 – 20	0.1 – 0.25	64	5.47
ЛКЗ 10, тяжёлая промышленность	5 – 15	20 – 30	0.2 – 0.5	7	0.57

Распределение выбранных площадок на территории Москвы и области показано на рис. 3.2. Для ЛКЗ 2 все 5 точек попали преимущественно в плотную (зачастую историческую) застройку в центральной части города, в пределах Третьего транспортного кольца. Для ЛКЗ 4 и ЛКЗ 5 разброс точек получился большим: выбраны локации в различных частях города и в городах-спутниках. Для ЛКЗ 6 большинство точек выбрано в пригородах, однако удалось найти и одну локацию внутри города. Из 20 локаций 14 расположены в границах Москвы (все – в пределах МКАД) и 6 – в Московской области.

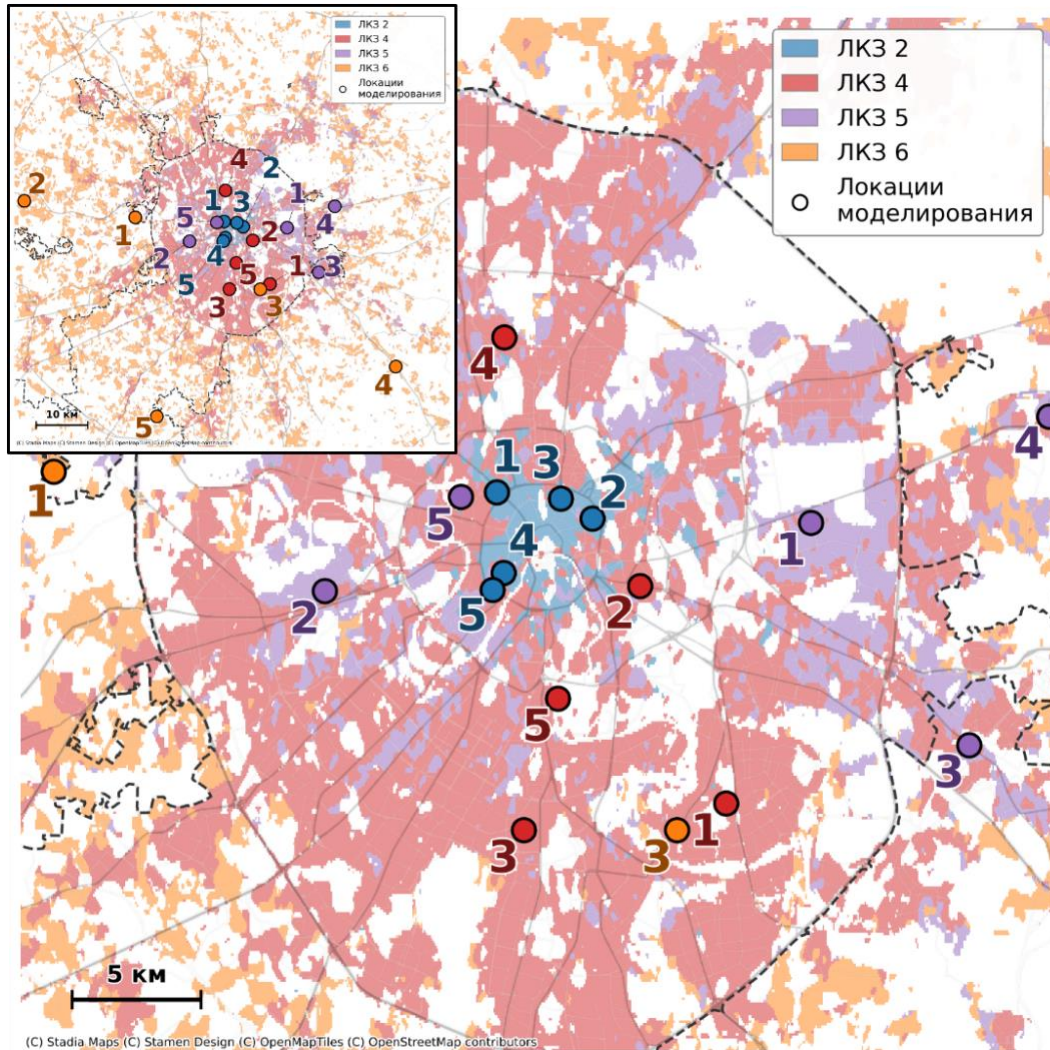


Рисунок 3.2. Карта исследуемых типов ЛКЗ в Москве и области, точки – локации моделирования реальной застройки (по 5 для каждой из выбранных ЛКЗ). Карта построена на основе данных региональной карты ЛКЗ для Москвы и окрестностей [Varentsov et al., 2020] и глобальной карты ЛКЗ [Demuzere et al., 2022].

Карты высот зданий для отобранных площадок были сформированы на основе открытых геоданных (OpenStreetMap, Яндекс Карты). Локальный рельеф территории и растительность

не учитывались – настоящее исследование сконцентрировано на влиянии именно городской застройки; впрочем, при подборе локаций по возможности избегались участки с выраженными перепадами высот рельефа. Для каждой локации задавался квадрат размером 400×400 м (плюс по 10% с каждой стороны для запаса), который и служил основой для построения карты высот и последующего моделирования. Ориентация (поворот) выбранной области подбиралась так, чтобы вдоль одной из её сторон – а именно вдоль левой границы после поворота – проходила улица или дорога, выбросы с которой далее имитировались в численных экспериментах. Геометрия зданий получалась путём растривания векторных полигонов зданий из открытых геоданных на сетку с требуемым пространственным разрешением. Для большинства зданий высота была явно указана в исходных данных; в случае её отсутствия высота рассчитывалась по указанной этажности. Для отдельных зданий без информации и о высоте, и об этажности высота определялась приблизительно по общедоступным уличным панорамам, спутниковым снимкам (Яндекс Карты, Google Maps) и по распределению высот окружающей застройки.

В табл. 3.2 представлено описание всех 20 выбранных площадок – по 5 на каждый тип ЛКЗ. Указанные для каждой локации координаты соответствуют точке $x = 25$ м, $y = 200$ м (рядом с левой границей по оси X , в середине области по оси Y) в локальных координатах области; ось X этих локальных координат направлена вдоль указанного в таблице азимута. Эта точка соответствует геометрическому центру источника выбросов аэрозолей, вытянутого вдоль оси Y (подробнее об источнике будет далее в разделе 3.2). В таблице также указаны адрес локации и название улицы внутри области, с которой при моделировании имитировались выбросы. Для каждой полученной карты высот рассчитаны средняя высота зданий и доля застроенной площади (плотность застройки).

Можно заметить, что для некоторых локаций значения доли застроенной площади проходят по нижней границе диапазона для соответствующего типа ЛКЗ из табл. 3.1 или даже оказываются ниже. Это связано с двумя обстоятельствами. Во-первых, тип ЛКЗ определяется не только по средней высоте и плотности застройки, но и по ряду дополнительных параметров (доля непроницаемой поверхности, отношение аспекта городского каньона и др.), поэтому по совокупности характеристик участок может уверенно относиться к данной ЛКЗ, при том, что отдельный параметр немного выходит за табличный диапазон. Во-вторых, в использованных картографических продуктах (OpenStreetMap, Яндекс Карты) некоторые здания и постройки могут быть представлены с упрощённой геометрией или вовсе пропущены; особенно это касается ЛКЗ 6 (среди рассмотренных типов), так как небольшие дома, пристройки, гаражи, сараи и прочие хозяйственные постройки нередко не зарегистрированы, не видны со спутника

и на уличных панорамах. Следовательно, реальная доля застроенной площади, особенно для конфигураций ЛКЗ 6, зачастую несколько выше, чем рассчитанная по картографированным полигонам. При этом средняя высота застройки во всех выбранных локациях строго соответствует табличным диапазонам из табл. 3.1.

Далее в тексте выбранные площадки называются конфигурациями застройки (одна локация = одна площадка/область = одна реальная конфигурация). Имя каждой конфигурации состоит из типа ЛКЗ и индекса конфигурации – например, ЛКЗ 4 «г2»; для реальных конфигураций индексы имеют вид «г{номер от 1 до 5}».

Таблица 3.2. Локации и параметры конфигураций реальной застройки в Москве и Московской области.

Тип ЛКЗ и индекс конфигурации	Координаты (° С.Ш, ° В.Д.), азимут оси X области	Адрес и улица-источник частиц	Средняя высота зданий, м	Доля застроенной площади, %
ЛКЗ 2 «г1»	55.770963, 37.592324, 46.2°	Москва, Тверской р-н, 1-я Бресткая ул.	18.9	40.8
ЛКЗ 2 «г2»	55.761816, 37.651673, 311°	Москва, Басманный р-н, ул. Покровка	13.6	41.4
ЛКЗ 2 «г3»	55.768771, 37.631998, 278.7°	Москва, Мещанский р-н, ул. Сретенка	12.2	46.6
ЛКЗ 2 «г4»	55.742801, 37.596516, 144.6°	Москва, р-н Хамовники, ул. Пречистенка	14.7	48.3
ЛКЗ 2 «г5»	55.736879, 37.589655, 212.4°	Москва, р-н Хамовники, Садовое кольцо (Зубовский бульв.)	14.1	40.1
ЛКЗ 4 «г1»	55.662353, 37.734253, 264.6°	Москва, р-н Люблино, Проектируемый пр-д № 8207	56.3	19.3
ЛКЗ 4 «г2»	55.738224, 37.680987, 10.9°	Москва, Таганский р-н, Нижегородская ул.	29.9	15.1
ЛКЗ 4 «г3»	55.653104, 37.609159, 179.3°	Москва, Нагорный р-н, Чонгарский бульв.	29.6	18.2
ЛКЗ 4 «г4»	55.824923, 37.596972, 1.6°	Москва, р-н Марфино, ул. Кашёнкин Луг	41.6	17.9
ЛКЗ 4 «г5»	55.698976, 37.630230, 88°	Москва, Даниловский р-н, наб. Марка Шагала	37.2	30.5
ЛКЗ 5 «г1»	55.760328, 37.786934, 70.7°	Москва, р-н Перово, 3-я Владимирская ул.	15.5	18.3

ЛКЗ 5 «r2»	55.736478, 37.485868, 244.2°	Москва, р-н Фили-Давыдково, Минская ул.	14.3	16.5
ЛКЗ 5 «r3»	55.682749, 37.884971, 220.7°	Московская обл., Люберцы, Октябрьский просп.	13.6	21.6
ЛКЗ 5 «r4»	55.797332, 37.934490, 2.4°	Московская обл., Балашиха, просп. Ленина	12.8	24
ЛКЗ 5 «r5»	55.769360, 37.570092, 185.4°	Москва, Пресненский р-н, Большой Тишинский пер.	20.2	24.9
ЛКЗ 6 «r1»	55.778116, 37.318049, 23.2°	Московская обл., д. Захарково, ул. Архитектора Тюрин	5.2	18.7
ЛКЗ 6 «r2»	55.806852, 36.975627, 258°	Московская обл., д. Красный посёлок, улица без названия	5.9	22.8
ЛКЗ 6 «r3»	55.653086, 37.704064, 307.5°	Москва, р-н Курьяново, МСД (Курьяновский бульв.)	5.8	18.8
ЛКЗ 6 «r4»	55.518178, 38.122436, 232.7°	Московская обл., д. Ивановка, Рязанское ш.	3.8	11.6
ЛКЗ 6 «r5»	55.430975, 37.384684, 201.3°	Московская обл., ДНП Европейская Долина-2, 46К- 2230	5.7	17.6

Помимо реальных локаций, для более полного описания возможных геометрий были рассмотрены и идеализированные случаи, значительно отличающиеся по степени регулярности внутренней структуры: идеализированная регулярная застройка (полностью периодическая структура из одинаковых зданий), и рандомизированная (квазислучайная) застройка с хаотично сгенерированными улицами и зданиями разных форм, ориентаций и размеров, но с сохранением осреднённых морфометрических параметров в допустимых пределах для выбранного типа ЛКЗ.

Для каждого из четырёх типов ЛКЗ было построено по три регулярных конфигурации, обозначенных индексами «а», «b», «с» и созданных вручную для оценки влияния размера, формы и ориентации зданий относительно набегающего потока: (а) – вытянутые здания, формирующие уличные каньоны перпендикулярно направлению ветра; (b) – те же здания, повернутые на 90 градусов, с каньонами параллельно ветру; (с) – здания квадратного сечения, представляющие «изотропный» случай (без выделяющегося одного направления ориентации). Такие регулярные структуры популярны в идеализированных исследовательских постановках, а с точки зрения реальной застройки имитируют районы, построенные по единому генеральному плану, что было характерно для отдельных периодов советского градостроительства [Engel, 2022].

Дополнительно для каждой ЛКЗ было сгенерировано по четыре рандомизированных конфигурации, обозначаемых индексами «1», «2», «3», «4». Эти конфигурации представляют собой квазислучайные структуры: с одной стороны, они являются случайными с точки зрения размера, формы и ориентации на уровне отдельных зданий и кварталов, а с другой – соответствуют общим морфометрическим признакам своего типа ЛКЗ. Хотя подходы к генерации городской геометрии с заданными характеристиками известны в литературе [Süzl et al., 2021; Zhou et al., 2023], существующие инструменты не всегда находятся в открытом доступе и часто ограничены в гибкости настройки, поэтому в настоящей работе был разработан собственный программный генератор, формирующий геометрию городской застройки в несколько этапов (рис. 3.3):

– Этап 1: формирование уличной сети (рис. 3.3, верхний ряд). На вход генератора подаются размеры расчётной области и морфометрические характеристики целевого типа ЛКЗ. На их основе определяются диапазоны допустимых размеров улиц и кварталов, после чего вся область случайным образом разделяется на прямоугольные кварталы и разделяющие их улицы вдоль осей X и Y ; ширина улиц и размеры кварталов задаются как случайные величины из этих диапазонов с равномерным распределением.

– Этап 2: застройка кварталов (рис. 3.3, нижний ряд). Внутри каждого сформированного квартала генерируются прямоугольные объекты-здания. Их горизонтальные размеры и высота также выбираются случайным образом, но с учётом ограничений, заданных для целевого типа ЛКЗ (по табл. 3.1), и дополнительных ограничений на минимальные и максимальные размеры зданий, призванных исключить нереалистично узкие или длинные строения и подобранных индивидуально для каждого типа ЛКЗ.

– Этап 3: валидация и регенерация. Для каждого квартала рассчитываются морфометрические характеристики (средняя высота зданий, плотность застройки, отношение аспекта каньонов). Если параметры отдельного квартала отклоняются от заданных для ЛКЗ более чем на 5%, здания в этом квартале генерируются заново. Если после нескольких попыток соответствие не достигается, либо если все кварталы одобрены, но отклонение для всей области в целом превышает 5%, запускается полная регенерация начиная с первого этапа.

Хотя такая случайная застройка не имеет точных аналогов в реальном городе, она существенно лучше регулярной отражает естественную гетерогенность большинства городских районов, которые редко обладают идеально периодической структурой. Важно отметить, что, несмотря на случайный характер расположения и размеров зданий, их

ориентация в рамках генератора оставалась дискретной: поскольку здания формировались на ортогональной сетке, их боковые грани были направлены строго вдоль оси X или оси Y , тогда как произвольные промежуточные направления не рассматривались. Это обстоятельство далее будет заметно в свойствах ориентационных характеристик рандомизированной застройки и является упрощением, но согласуется с застройкой многих современных городов, имеющих ортогональную структуру улиц.

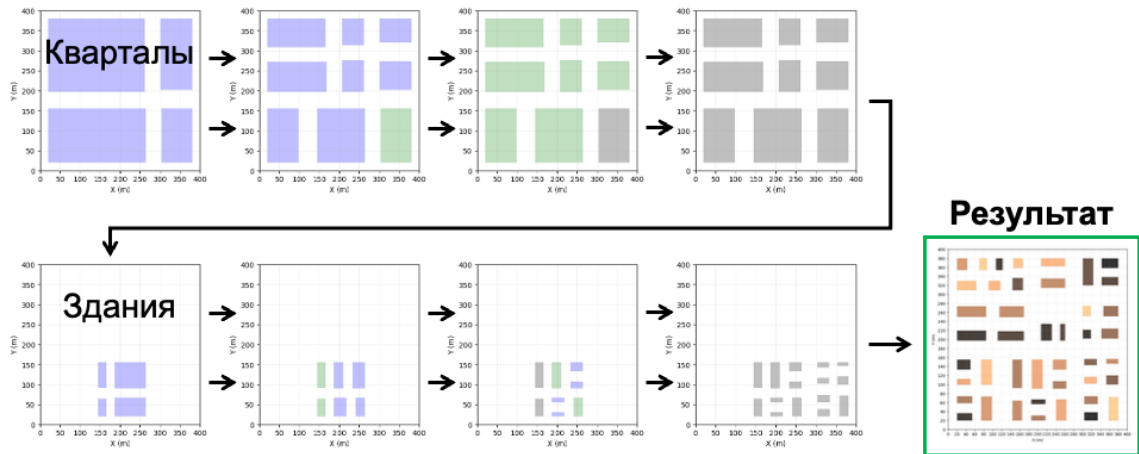


Рисунок 3.3. Пример пошаговой генерации кварталов и зданий для рандомизированной застройки. Синим цветом обозначены структуры, созданные на текущем шаге, зелёным – на предыдущем, серым – два и более шагов назад.

Таким образом, общий объём набора составил по 12 конфигураций на каждый тип ЛКЗ (3 регулярных + 4 рандомизированных + 5 реальных) – 48 конфигураций в сумме по четырём ЛКЗ. Карты высот для всех конфигураций каждого типа ЛКЗ показаны на рис. 3.4–3.7.

На рис. 3.4 представлены карты высот для конфигураций ЛКЗ 2. Застройка очень плотная, при этом регулярные конфигурации значительно различаются по ориентации и паттерну каньонов. В рандомизированных конфигурациях видно случайное расположение улиц, кварталов и зданий внутри них; общая структура при этом сохраняет узнаваемую городскую морфологию. Среди реальных конфигураций визуальнo выделяются как более регулярные, с выраженным направлением каньонов («r1», «r3»), так и существенно более хаотичные, с улицами, кварталами и зданиями различных ориентаций и масштабов («r2», «r5»). В каждой реальной конфигурации присутствует разброс высот: единичные здания могут выходить за пределы диапазона средней высоты ЛКЗ 2 (10–25 м), однако большинство ему соответствует.

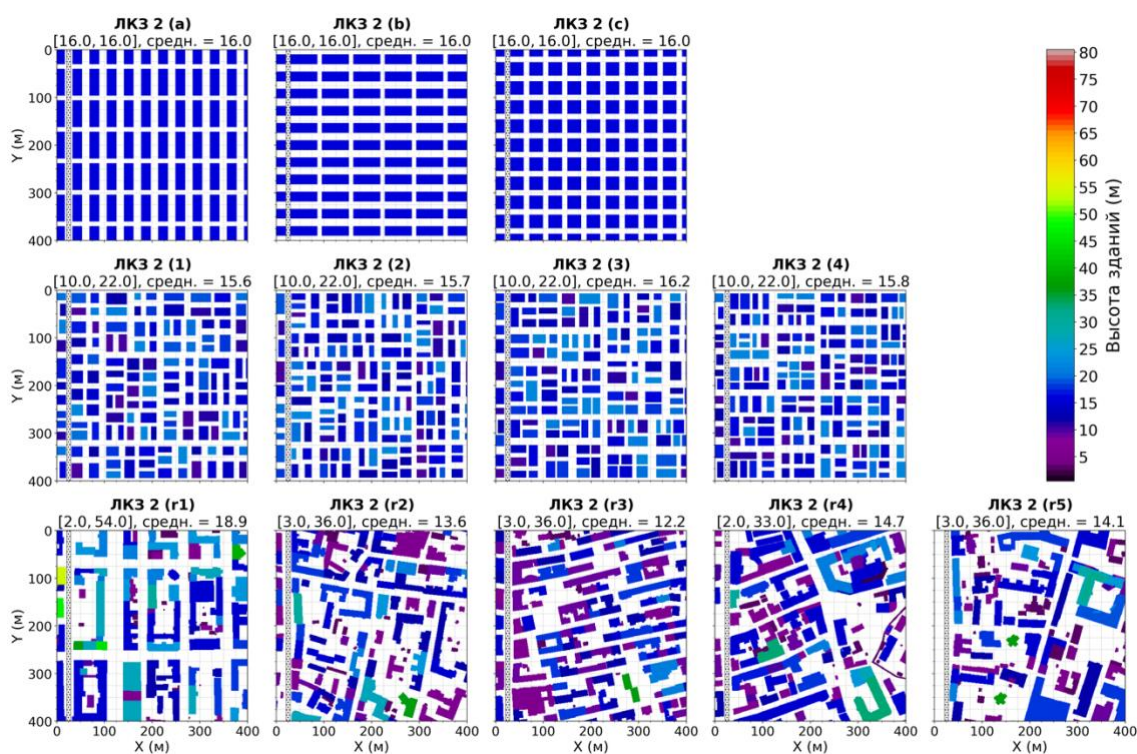


Рисунок 3.4. Карты высот для регулярных (верхний ряд), рандомизированных (средний ряд) и реальных (нижний ряд) конфигураций застройки ЛКЗ 2. Штриховкой обозначено расположение источника частиц.

На рис. 3.5 представлены карты высот для конфигураций ЛКЗ 4. Регулярные и рандомизированные конфигурации устроены аналогично ЛКЗ 2, однако плотность застройки заметно ниже; в рандомизированной застройке местами появляются разреженные участки, имитирующие пространства без зданий: площади, парки, парковки, пустыри и т.д. Среди реальных конфигураций снова визуально выделяются как довольно регулярные («r1», «r5»), так и более хаотичные («r2»). В реальной застройке ЛКЗ 4 наблюдается очень большой разброс высот – от зданий с одним-двумя этажами (коммерция, социальная инфраструктура, технические строения) до зданий в 20-30 этажей высотой до 77 м (в конфигурации «r1»). Наибольший среди рассмотренных ЛКЗ разброс наблюдается и между средними высотами реальных конфигураций – от 29 до 56 м.

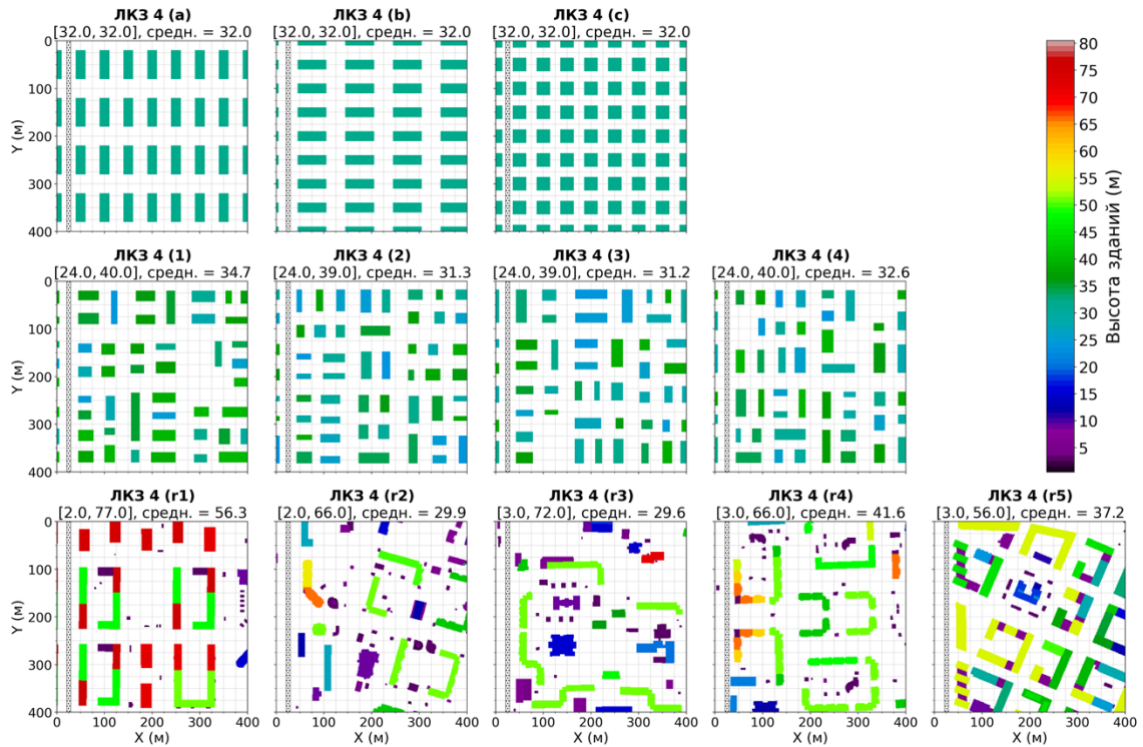


Рисунок 3.5. Карты высот для регулярных (верхний ряд), рандомизированных (средний ряд) и реальных (нижний ряд) конфигураций застройки ЛКЗ 4. Штриховкой обозначено расположение источника частиц.

На рис. 3.6 представлены карты высот для конфигураций ЛКЗ 5. Регулярные и рандомизированные конфигурации устроены аналогично ЛКЗ 4, но при меньших высотах зданий. Среди реальных конфигураций бросается в глаза плановая поквартальная застройка («r1», «r2», «r4») – типичными примерами ЛКЗ 5 в Москве и области являются кварталы советской постройки (пятиэтажные панельные дома и кирпичные здания первой половины и середины 20-го века). Такие конфигурации визуально выделяются регулярностью на масштабе кварталов, при этом отдельные здания внутри них могут заметно различаться по масштабу и ориентации, особенно в глубине дворов.

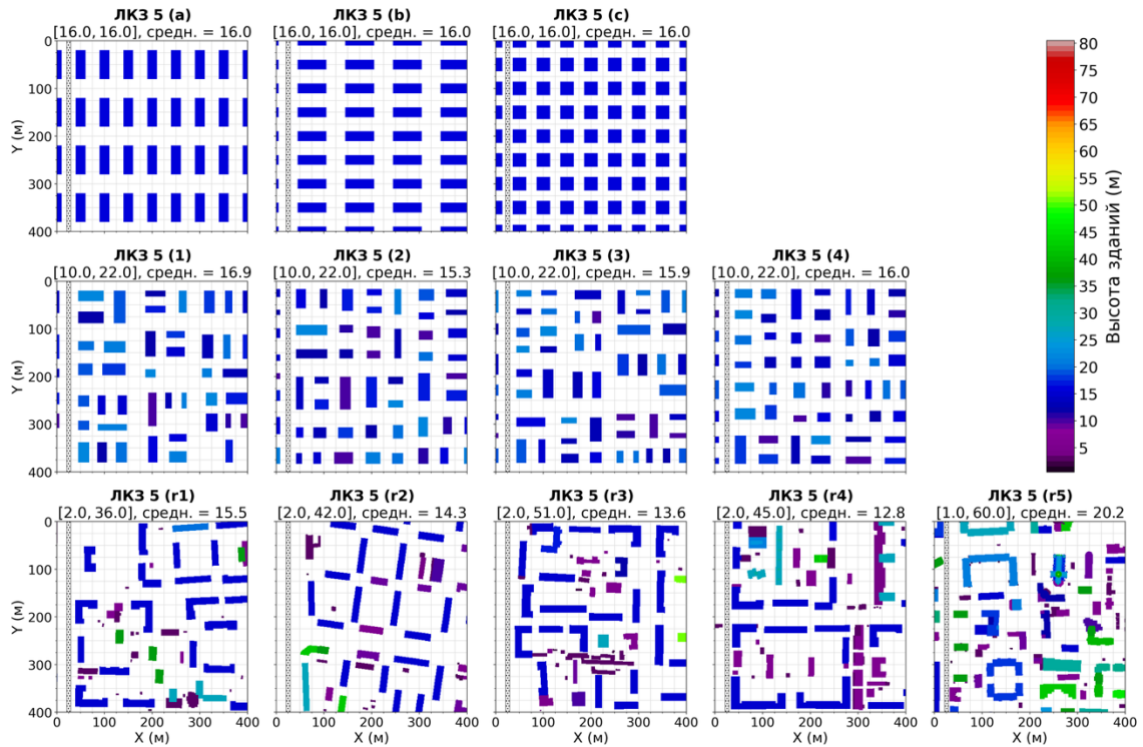


Рисунок 3.6. Карты высот для регулярных (верхний ряд), рандомизированных (средний ряд) и реальных (нижний ряд) конфигураций застройки ЛКЗ 5. Штриховкой обозначено расположение источника частиц.

На рис. 3.7 представлены карты высот для конфигураций ЛКЗ 6. Регулярные конфигурации аналогичны ЛКЗ 4 и ЛКЗ 5 с поправкой на меньшие высоты зданий. Рандомизированные конфигурации имеют небольшие горизонтальные размеры зданий, характерные для частных домов в пригороде. В реальной застройке ЛКЗ 6, в отличие от других рассмотренных типов, разброс высот зданий невелик, однако внутренняя структура между конфигурациями различается очень сильно. Среди них можно выделить довольно хаотичную застройку одиночными частными домами («r1», «r4»), коттеджи с регулярными улицами и многообразием масштабов построек между ними («r5»), блоки регулярных таунхаусов, вытянутые в разных направлениях («r2»), а также плановую застройку малоэтажными многоквартирными домами с регулярными кварталами («r3»).

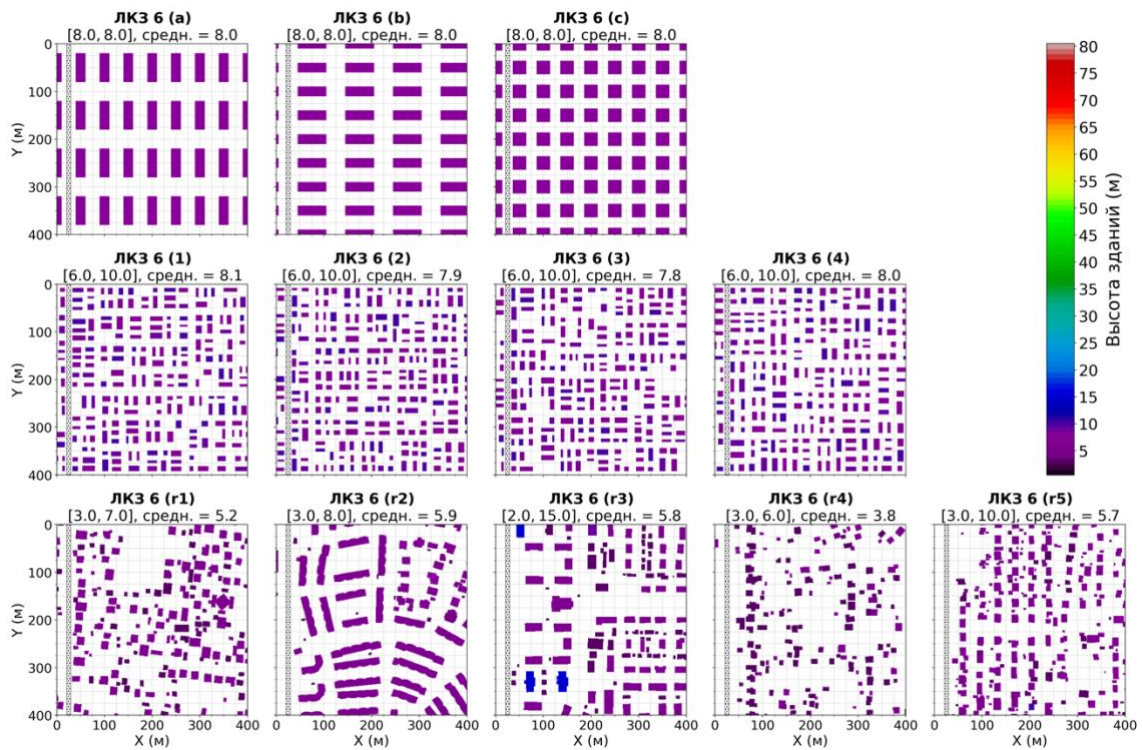


Рисунок 3.7. Карты высот для регулярных (верхний ряд), рандомизированных (средний ряд) и реальных (нижний ряд) конфигураций застройки ЛКЗ 6. Штриховкой обозначено расположение источника частиц.

На рис. 3.8 представлена диаграмма рассеяния всех 48 конфигураций по двум базовым морфометрическим параметрам – средней высоте зданий \bar{H} (ось Y) и доле застроенной площади λ_p (плотности застройки, ось X); типы ЛКЗ выделены цветом, а способы генерации геометрии (регулярная, рандомизированная, реальная) – формой маркера. Наблюдается ожидаемая кластеризация конфигураций по типам ЛКЗ: ЛКЗ 4, 5 и 6 чётко различаются по средней высоте, а облако конфигураций ЛКЗ 2 совпадает по средней высоте с ЛКЗ 5, но смещено в область больших плотностей. Одновременно внутри облака каждого типа ЛКЗ прослеживается значительный разброс – как по средней высоте (особенно у ЛКЗ 4), так и по плотности застройки (особенно у ЛКЗ 6). Этот разброс хорошо согласуется с самим определением ЛКЗ: тип ЛКЗ – это не точка в пространстве параметров, а довольно широкий диапазон.

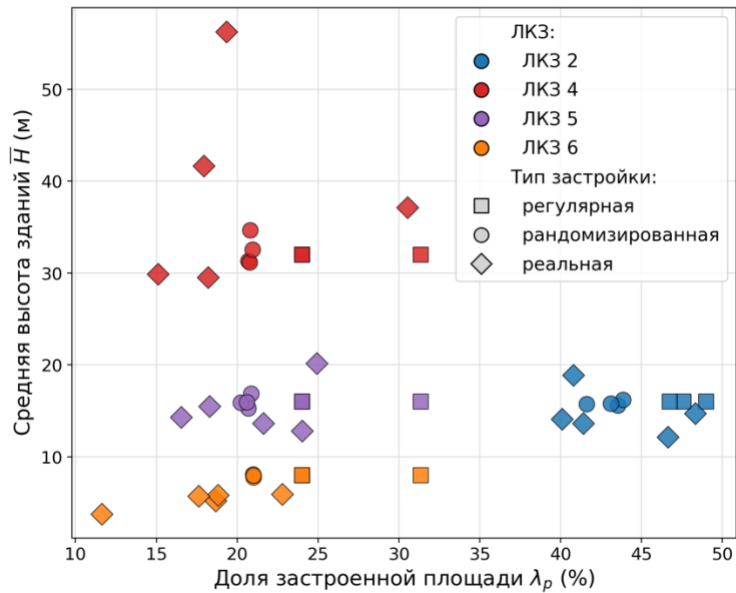


Рисунок 3.8. Диаграмма рассеяния геометрических параметров исследуемых конфигураций застройки, ось X – доля застроенной площади (плотность застройки), ось Y – средняя высота зданий.

Параметры \bar{H} и λ_p являются интегральными и изотропными скалярными характеристиками: они описывают конфигурацию застройки в среднем по области и не зависят от направления ветра. При этом они никак не описывают её внутреннюю структуру – насколько застройка регулярна или хаотична, насколько различаются масштабы отдельных её элементов и равномерно ли они распределены, насколько по-разному она работает как препятствие для воздушного потока при разных направлениях ветра. Поэтому для дальнейшего количественного описания конфигураций необходимо ввести морфометрические параметры, характеризующие именно внутреннюю геометрию застройки. Ниже последовательно рассматриваются метрики, отвечающие двум независимым осям: свойствам застройки, связанным с направлением ветра (индекс фронтальной площади, относительный фронтальный индекс, индекс анизотропии), и изотропной структурной неоднородности (коэффициент вариации высот зданий и спектральная энтропия Шеннона поля высот).

В первую очередь рассмотрим индекс фронтальной площади λ_f – безразмерный параметр, характеризующий, насколько крупным препятствием для воздушного потока при заданном направлении ветра φ является городская застройка. Индекс давно и широко применяется в городской аэродинамике и микрометеорологии для оценки шероховатости поверхности и параметризации сопротивления городской застройки [Grimmond, Oke, 1999; Xu, Gao, 2022]. Он определяется как отношение суммарной площади наветренных стен зданий,

спроецированная на нормальную к направлению ветра плоскость, к площади горизонтальной проекции расчётной области:

$$\lambda_f(\varphi) = \frac{a_{frontal}(\varphi)}{a_{total}}, \quad (3.1)$$

где $a_{frontal}(\varphi)$ – суммарная площадь наветренных стен зданий, спроецированная на плоскость, перпендикулярную направлению ветра φ , a_{total} – площадь горизонтальной проекции расчётной области.

Например, для застройки в виде периодических городских каньонов (регулярные конфигурации «а» и «б») λ_f будет принимать минимальное значение при ветре, дующем вдоль каньонов (потoku требуется обтекать только короткие торцы зданий), и максимальное – при ветре, перпендикулярном каньонам (потoku приходится обтекать длинные стороны зданий с большой площадью поверхности). Индекс λ_f зависит как от направления ветра, так и от абсолютной площади наветренных стен – следовательно, и от высоты и плотности застройки: при сравнении двух конфигураций с одинаковым расположением и горизонтальными размерами зданий, но разной высотой, у более высокой конфигурации значения λ_f будут систематически выше.

Чтобы перейти к характеристике, описывающей именно направленные свойства конкретной застройки и не зависящей от её средней высоты и плотности, удобно ввести относительный индекс фронтальной площади $\tilde{\lambda}_f$ (далее «относительный фронтальный индекс»), нормированный на средний по всем направлениям ветра индекс фронтальной площади $\overline{\lambda}_f$:

$$\tilde{\lambda}_f(\varphi) = \lambda_f(\varphi) / \overline{\lambda}_f \quad (3.2)$$

Диапазон значений $\tilde{\lambda}_f$ зависит только от анизотропии застройки – от того, насколько по-разному городская геометрия работает как препятствие при разных направлениях ветра, – и при этом нечувствителен к её средней высоте и плотности. Если рассмотреть две конфигурации с одинаковым расположением и горизонтальными размерами зданий, но разной высотой (один из примеров выше), относительный фронтальный индекс у них будет идентичным. Если же интерпретировать λ_f как площадь наветренных стен, нормированную на площадь области, то $\tilde{\lambda}_f$ можно понимать как тот же индекс, дополнительно нормированный на среднее значение по всем направлениям – то есть как двойную нормировку, сначала на площадь области, затем на среднюю площадь наветренных стен.

На рис. 3.9 для трёх характерных конфигураций застройки (регулярной, рандомизированной и реальной) построены угловые диаграммы относительного фронтального индекса $\tilde{\lambda}_f$ – его зависимости от направления ветра, построенной в полярных координатах. На каждой диаграмме приведено и среднее значение индекса фронтальной площади $\bar{\lambda}_f$, по которому видна разница в высоте и плотности застройки.

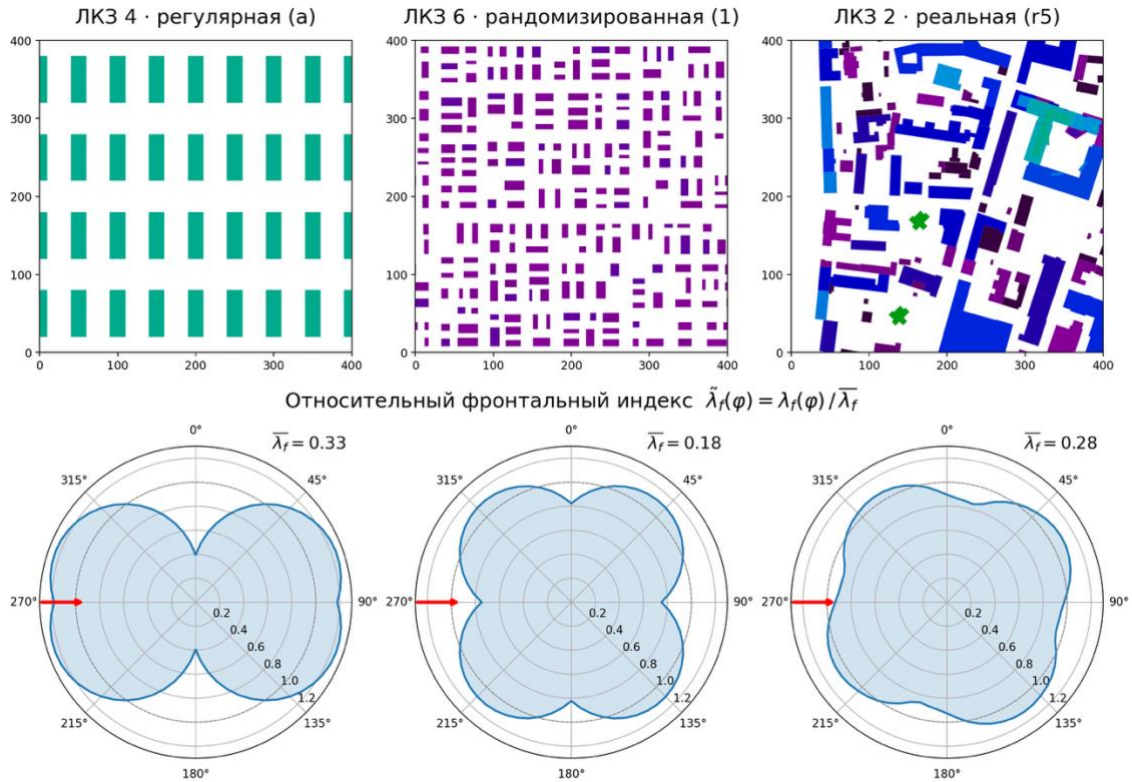


Рисунок 3.9. Зависимость относительного фронтального индекса $\tilde{\lambda}_f$ от направления ветра (нижний ряд) для примеров регулярной, рандомизированной и реальной застройки (верхний ряд). Красной стрелкой обозначено направление ветра в проведённых численных экспериментах.

Для регулярной застройки $\tilde{\lambda}_f$ принимает максимум (порядка 1.2) при перпендикулярном каньонам ветре и при небольших отклонениях от этого направления, а минимум (порядка 0.4) – при направлении вдоль каньонов. Заметно, что общий разброс значений велик. Для рандомизированной конфигурации разница между минимумом (около 0.8) и максимумом (около 1.15) уже существенно меньше, форма диаграммы заметно симметричнее; при этом из-за упомянутой ранее ортогональной ориентации зданий минимумы $\tilde{\lambda}_f$ располагаются вдоль осей X и Y . Для выбранного примера реальной застройки наблюдаемый разброс $\tilde{\lambda}_f$ минимален среди трёх рассмотренных конфигураций и варьируется примерно от 0.85 до 1.10. Направления

минимумов и максимумов оказываются смещены относительно осей X и Y и размыты по более широкому спектру углов, поскольку улицы в реальной застройке имеют разные ориентации.

Чтобы охарактеризовать анизотропию конкретной конфигурации одним числом, удобно ввести индекс анизотропии застройки A_f – относительный разброс индекса фронтальной площади по всем направлениям ветра, равный коэффициенту вариации $\lambda_f(\theta)$ по угловой диаграмме:

$$A_f = \sigma(\lambda_f(\varphi)) / \bar{\lambda}_f, \quad (3.3)$$

где $\sigma(\lambda_f(\varphi))$ – среднеквадратическое отклонение λ_f по всему кругу направлений ветра.

Как и в случае с относительным фронтальным индексом, нормировка на $\bar{\lambda}_f$ позволяет сравнивать разные конфигурации без влияния их средней высоты и плотности. Индекс A_f является интегральной характеристикой: он описывает сразу для всех направлений ветра, насколько сильно эффект от застройки как препятствия зависит от направления набегающего потока. Минимальное значение $A_f = 0$ соответствует идеально изотропной застройке – например, абсолютно ровной плоской поверхности или одному осесимметричному зданию с круглым основанием. Максимальное возможное значение A_f соответствует серии бесконечно длинных и тонких параллельных стен (или одной такой стене) и зависит от того, с каким шагом строится угловая диаграмма $\lambda_f(\theta)$: при непрерывном обходе оно составляет приблизительно $A_f^{\max} \approx 0.483$, при дискретном обходе только по четырём направлениям (вдоль и поперёк стены) – $A_f^{\max} = 1$. В настоящей работе индекс анизотропии A_f рассчитывался по угловой диаграмме с шагом 1° , поэтому его максимально возможное значение приблизительно составляет ≈ 0.483 .

Сводное сопоставление введённых направленных морфометрических индексов между собой показано на двух первых панелях рис. 3.10. На рис. 3.10а конфигурации застройки сравниваются в координатах «индекс фронтальной площади λ_f – относительный фронтальный индекс $\tilde{\lambda}_f$ ». Переход от λ_f к нормированному $\tilde{\lambda}_f$ позволяет разделить конфигурации по анизотропным эффектам застройки независимо от эффектов высоты и плотности, которые продолжают прослеживаться для λ_f : вдоль оси Y заметно разделение конфигураций по типам ЛКЗ с разной средней площадью наветренных стен – наименьшие значения λ_f у ЛКЗ 6, наибольшие у ЛКЗ 2 и ЛКЗ 4. На рис. 3.10б конфигурации сравниваются в координатах «индекс анизотропии A_f – относительный фронтальный индекс $\tilde{\lambda}_f$ ». Картина ожидаема: у

застройки с высокой анизотропией возможны наибольшие отклонения $\tilde{\lambda}_f$ от единицы, что и наблюдается для всех регулярных конфигураций «а» и «b», а также для реальной конфигурации ЛКЗ 4 «г1» с выраженной регулярной структурой. Любопытно, что реальная застройка в целом ближе к $\tilde{\lambda}_f = 1$, чем рандомизированная: в последней здания ориентированы только вдоль осей X и Y (четыре выраженных направления, как уже отмечалось при описании генератора), тогда как в реальной застройке улицы и здания могут быть ориентированы под произвольным углом, что и сглаживает направленный сигнал.

Помимо средней высоты \bar{H} и плотности застройки λ_p , существенную роль играет внутренняя неоднородность поля высот, не учитываемая интегральными скалярными характеристиками. Для её количественного описания использовались две взаимодополняющие метрики: коэффициент вариации высот CV_H , описывающий разброс высот относительно среднего значения, и спектральная энтропия Шеннона S_H , характеризующая степень упорядоченности пространственной структуры поля застройки.

Коэффициент вариации высот определяется как:

$$CV_H = \sigma(H)/\bar{H}, \quad (3.4)$$

где $\sigma(H)$ – стандартное отклонение высот зданий в пределах области. Эта величина является безразмерным относительным показателем разброса высот: $CV_H = 0$ для застройки, состоящей из зданий одинаковой высоты (как в регулярных конфигураций), и возрастает по мере увеличения неоднородности высот. Важно, что CV_H нечувствителен к пространственному расположению зданий: любые перестановки высот в плане оставляют его значение неизменным.

Спектральная энтропия Шеннона S_H , напротив, является мерой именно пространственной упорядоченности поля высот и позволяет различать конфигурации с одинаковыми гистограммами высот, но разной геометрической структурой. Для её вычисления двумерное поле высот $H(x, y)$, заданное на регулярной расчётной сетке, подвергается двумерному дискретному преобразованию Фурье; квадраты модулей Фурье-коэффициентов дают спектральную плотность мощности $P(k_x, k_y)$, описывающую вклад различных пространственных частот в формирование поля. Нулевая (DC) компонента $P(0, 0)$, отвечающая среднему уровню поля, из дальнейшего анализа исключается, что позволяет характеризовать структуру отклонений высот от среднего, а не их абсолютный уровень. Нормировка спектра позволяет интерпретировать его как дискретное распределение вероятностей по

пространственным частотам, после чего энтропия Шеннона вычисляется стандартным образом:

$$p(k_x, k_y) = \frac{P(k_x, k_y)}{\sum_{k_x, k_y} P(k_x, k_y)}, \quad (3.5)$$

$$S_H = \frac{-\sum_{k_x, k_y} p(k_x, k_y) \log_2 p(k_x, k_y)}{\log_2 N}, \quad (3.6)$$

где N – число учитываемых спектральных мод, а смысл знаменателя в (3.6) в нормировании на максимально возможное значение, так что $S_H \in [0, 1]$ и может быть интерпретирована как доля максимально возможной «равномерности» спектра. Полученная энтропия S_H – мера упорядоченности поля высот как двумерной функции.

Физический и геометрический смысл этой метрики наиболее прозрачен в двух предельных случаях. Если поле высот представляет собой строго периодическую структуру (как в регулярных конфигурациях), его энергия концентрируется в небольшом числе спектральных мод, соответствующих базовому шагу решётки (шагу повторения зданий) и его гармоникам; распределение $p(k_x, k_y)$ оказывается резко сконцентрированным, и энтропия S_H принимает низкие значения. Напротив, для пространственно «случайного» поля без выраженных регулярных масштабов спектральная мощность распределена по широкому диапазону мод почти равномерно, что соответствует значениям S_H , близким к единице ($S_H = 1$ для белого шума). Таким образом, S_H может интерпретироваться как «индекс хаотичности» застройки: чем выше его значение, тем менее упорядоченной и менее предсказуемой по геометрической структуре является конфигурация.

Использование спектральной энтропии как меры пространственной сложности городской среды развивает идеи, известные в географии и урбанистике с середины 1970-х годов, когда М. Бэтти предложил применять меру энтропии к городским полям [Batty, 1974]; в современной литературе близкие по духу метрики применяются для классификации сетей улиц [Boeing, 2019] и для оценки морфологического разнообразия застройки, в т.ч. в задачах городской метеорологии [Mohajeri, Gudmundsson, 2014; Lu et al., 2023].

Совместное использование CV_H и S_H оказывается информативным, поскольку эти метрики чувствительны к разным аспектам неоднородности застройки. CV_H определяется гистограммой высот зданий в ячейке и инвариантен к любым пространственным перестановкам зданий. Спектральная энтропия S_H , напротив, инвариантна к мультипликативному масштабированию высот и к их общему сдвигу, но чувствительна как к

взаимному расположению зданий, так и к их относительным высотам. Таким образом, CV_H описывает разброс высот, не "видя" их пространственного расположения, а S_H – пространственную структуру поля высот в целом, не «видя» абсолютного масштаба.

Связь спектральной энтропии с анизотропией застройки иллюстрирует рис. 3.10в: облако точек на плоскости (S_H, A_f) имеет характерную форму, близкую к «треугольной». Нижняя граница облака практически не зависит от S_H – даже при высокой степени пространственной упорядоченности (низкий S_H) конфигурация может оставаться изотропной (если она упорядочена симметрично по всем направлениям). Верхняя же граница снижается с ростом S_H : высокие значения A_f достигаются только при низких S_H , то есть при наличии в застройке выраженной регулярной структуры с выделенным направлением. Этот результат согласуется с физической интерпретацией обеих метрик: для формирования выраженной анизотропии лобовой площади необходима пространственная концентрация застройки на определённых масштабах и направлениях, что несовместимо с высокой спектральной энтропией. Хаотичные конфигурации, в которых геометрия эффективно «усредняется» по направлениям, имеют ограниченный сверху уровень анизотропии A_f .

Совместное распределение S_H и CV_H (рис. 3.10г) демонстрирует чёткое разделение конфигураций на три кластера, соответствующие трём типам генерации застройки. Регулярные конфигурации отражают одновременную упорядоченность (низкие значения S_H) и однородность по высоте ($CV_H = 0$). Рандомизированные конфигурации образуют компактную группу с высокими S_H и умеренными CV_H – их генератор обеспечивает пространственную случайность, но варьирует высоты в заданном ограниченном диапазоне. Реальные конфигурации занимают область высоких значений как S_H , так и CV_H , что соответствует разнообразию пространственных масштабов и широкому диапазону этажности. Исключением является большинство реальных конфигураций ЛКЗ 6, которые по разбросу высот тяготеют к кластеру рандомизированных конфигураций. В отличие от ЛКЗ 2, 4, 5, в рассмотренных реальных конфигурациях ЛКЗ 6 почти не встречаются здания, высоты которых выходят за диапазон этого типа ЛКЗ. Следовательно, и кластер рандомизированной застройки может объединиться с реальной, если при генерации карт высот допустить возможность для некоторых зданий иметь высоту за пределами диапазона выбранного типа ЛКЗ.

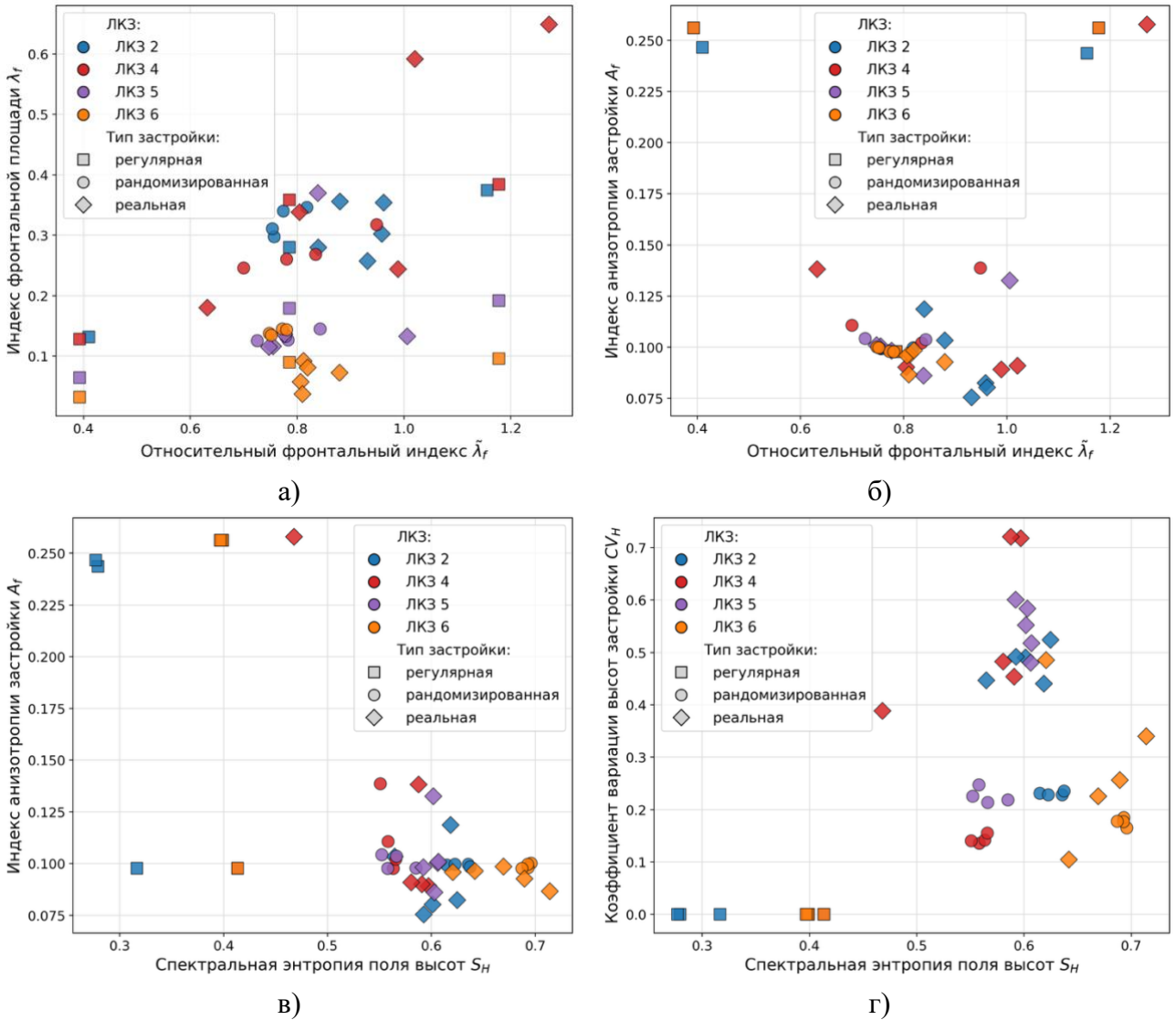


Рисунок 3.10. Диаграммы рассеяния исследуемых конфигураций застройки по: относительному фронтальному индексу $\tilde{\lambda}_f$ и индексу фронтальной площади λ_f (а), $\tilde{\lambda}_f$ и индексу анизотропии застройки A_f (б), спектральной энтропии поля высот S_H и A_f (в), S_H и коэффициенту вариации высот застройки CV_H (г).

Совокупный анализ четырёх панелей рис. 3.10 приводит к важному для последующего обсуждения наблюдению. Классификация ЛКЗ эффективно разделяет конфигурации по базовым интегральным характеристикам застройки (средней высоте H , плотности застройки λ_p) и в этом отношении остаётся естественной и удобной основой для типологического описания городской среды. Вместе с тем внутри одного типа ЛКЗ конфигурации могут заметно различаться по степени упорядоченности застройки (S_H), направленности (A_f , $\tilde{\lambda}_f$) и разбросу высот (CV_H), причём эти различия не учитываются макропараметрами LCZ. Возникает вопрос, в какой мере подобная внутриклассовая вариативность геометрии (внутри одной ЛКЗ)

транслируется в различия аэродинамических и диффузионных характеристик: если такие различия систематичны и количественно значимы – по крайней мере для отдельных типов застройки – то описание поведения воздушного потока и примеси может требовать привлечения дополнительных морфометрических предикторов в дополнение к классификации ЛКЗ. Количественная проверка этого предположения составляет одну из задач последующих разделов.

3.2 Постановка численных экспериментов

Для исследования переноса аэрозолей различной природы, размера и массы в качестве модельных были выбраны пять типов монодисперсных частиц-представителей характерных аэрозольных фракций, наблюдаемых в городской среде: ультрадисперсные частицы (UFP), мелкодисперсный аэрозоль PM_{2.5}, крупнодисперсный аэрозоль PM₁₀, пыльца и крупная минеральная пыль. Их параметры, основные источники и характер влияния на качество воздуха и здоровье человека приведены в таблице 3.3.

Таблица 3.3. Исследуемые моноразмерные типы частиц, какие аэрозольные фракции они представляют и их параметры в лагранжевой модели. Скорость гравитационного оседания рассчитана по закону Стокса (2.16).

Название типа на графиках	Диаметр частиц, мкм	Плотность материала, кг/м ³	Основные источники эмиссии в городе	Влияние на жизнь и здоровье	Скорость гравитационного оседания, м/с
UFP (ultrafine particles)	0.05	1000	Сажа из двигателей внутреннего сгорания	Проникновение в кровеносную систему	$7.6 \cdot 10^{-8}$
PM_{2.5}	0.8	1650	Вторичный аэрозоль, крупные продукты горения	Проникновение в лёгкие, образование смога	$3.2 \cdot 10^{-5}$
PM₁₀	5	4000	Износ тормозов и шин, придорожная пыль	Проникновение в воздушные пути, высокая токсичность	$3.0 \cdot 10^{-3}$
Пыльца	22	800	Растительность	Аллергия, видимое загрязнение на поверхностях	$1.1 \cdot 10^{-2}$
Крупная пыль	50	2650	Строительная пыль, песок, придорожная пыль	Видимое загрязнение на поверхностях, снижение видимости	$2.0 \cdot 10^{-1}$

Частицы-представители фракции UFP (ультрадисперсные частицы, ultrafine particles) имитируют сажу от выхлопов двигателей и обладают наименьшей скоростью оседания, что делает их идеальными трассерами для изучения турбулентной диффузии. Представители фракции PM_{2.5} представляют собой классический мелкодисперсный аэрозоль, способный проникать глубоко в дыхательную систему [Pope, Dockery, 2006]. Их свойства соответствуют типичным городским аэрозолям, изученным в работе [Zwozdziak et al., 2017]. Частицы-представители PM₁₀ имитируют более крупную и тяжёлую фракцию, выбранная высокая плотность материала соответствует в том числе тяжёлым металлам (продукту износа тормозов). Пыльца представляет собой пример значительно более крупных (22 мкм), но относительно лёгких частиц с умеренной скоростью оседания. Наконец, крупная пыль (50 мкм) имитирует строительную или дорожную минеральную пыль, для которой гравитационное оседание является доминирующим процессом.

Все численные эксперименты проводились с использованием LES-модели НИВЦ МГУ и ИВМ РАН со встроенным лагранжевым модулем, описанным в Главе 2. В ней в качестве замыкающей подсеточной модели для импульса и потенциальной температуры использовалась динамическая модель Смагоринского с лагранжевым осреднением коэффициента. Аэродинамическая шероховатость подстилающей поверхности (земля, крыши и стены зданий) задавалась равной $z_{0m} = 0.1$ м. Параметр Кориолиса в расчётах принимался равным нулю, что оправдано малым горизонтальным и вертикальным масштабом исследуемой области (порядка сотен метров) и фокусом исследования на внутригородской турбулентной динамике.

Расчёты проводились в области размером 400×400×200 м с использованием регулярной декартовой сетки 400×400×136 ячеек. Для конфигураций реальной застройки область была расширена до 480×440×240 м (480×440×152 ячейки) для адаптации течения, однако для анализа использовалась её центральная часть аналогичного размера по горизонтали (400×400 м). Это соответствует разрешению 1 м по горизонтали для всех конфигураций. По вертикали разрешение составляло 1 м в нижнем 80-метровом слое, а выше шаг сетки увеличивался на 4% с каждым уровнем, но не превышал 2.5 м. Шаг по времени был фиксирован и составлял 0.04 с. Общий период моделирования для каждого эксперимента – 6 часов, из которых первые 2 часа отводились на адаптацию потока к геометрии поверхности и достижение квазистационарного состояния (как правило, это происходило через 1–1.5 ч), а последние 4 часа использовались для сбора статистики и осреднения результатов. Поля термогидродинамических переменных и концентраций осреднялись по времени с дискретностью раз в 5 расчётных шагов (раз в 0.2 с).

Воспроизводились условия приземного слоя атмосферы, характерные для пасмурного дня без каких-либо аномальных погодных условий. Выбор нейтральной стратификации (нулевой начальный градиент потенциальной температуры при равномерном начальном значении $\theta_0 = +15$ °С, поток явного тепла со всех поверхностей в атмосферу $6 \text{ Вт} / \text{м}^2$, близкий к нулю, предотвращающий развитие устойчивости) позволяет изолировать эффекты механической турбулентности, генерируемой застройкой, от более сложных термических эффектов, связанных с конвекцией или подавлением турбулентности при устойчивой стратификации. Начальный профиль скорости ветра задавался формулой для полуканала с заданной средней скоростью $3 \text{ м} / \text{с}$, в дальнейшем поток адаптировался к геометрии застройки. Задание слабого ветра (фоновый градиент давления $dp/dx = -0.8 \text{ гПа} / 100 \text{ км}$, что соответствует скорости ветра на высоте $\sim 100 \text{ м}$ около $2\text{-}5 \text{ м} / \text{с}$ в зависимости от застройки) позволяет изучить неблагоприятные с точки зрения качества воздуха условия, когда вентиляция городской застройки ослаблена. Для термогидродинамических переменных на боковых границах области устанавливались периодические граничные условия, что позволяло адаптировать воздушный поток к выбранному типу застройки.

Для оценки влияния метеорологических условий, помимо нейтральной стратификации, была проведена дополнительная облегчённая серия экспериментов в условиях слабоустойчивой стратификации атмосферы только для регулярных и рандомизированных конфигураций, как крайних случаев упорядоченности застройки, и только для ЛКЗ 4, 5, 6, как наиболее распространённых и при этом различающихся по высоте – всего 21 конфигурация (3 типа ЛКЗ \times (3 регулярных + 4 рандомизированных)). Пространственное разрешение расчётной сетки в этой серии экспериментов составило 2 м по горизонтали и по вертикали. В связи с этим прямое количественное сопоставление абсолютных значений между двумя сериями требует осторожности; ниже анализ слабоустойчивой стратификации фокусируется на качественных закономерностях и относительных различиях между конфигурациями.

Режим слабоустойчивой стратификации характеризует условия ночного выхолаживания или зимнего периода, когда в приземном слое формируются инверсионные условия, препятствующие рассеянию примесей. В модели данные условия задавались через отрицательный поток явного тепла на горизонтальных поверхностях ($-10 \text{ Вт} / \text{м}^2$) и нулевой поток на стенах; начальный градиент потенциальной температуры составил $0.02 \text{ К} / \text{м}$ (начальное приземное значение $\theta_0 = +15$ °С сохранялось). В процессе установления квазистационарного режима профиль температуры трансформировался, формируя слабую приземную инверсию (см. далее раздел 3.3). Другие начальные и граничные условия остались

без изменений. Целью проведения этой дополнительной серии расчётов было сравнение результатов для нейтральной и слабоустойчивой стратификации ради оценки чувствительности выявленных закономерностей влияния городской морфологии к малым вариациям стратификации и проверка, будут ли ключевые выводы для нейтральной стратификации работать в других метеорологических условиях, ещё более неблагоприятных для вентиляции городского полога.

Моделировалось два варианта эмиссии аэрозольных частиц (рис. 3.11): локальные уличные выбросы (приповерхностный источник, далее «уличный» источник) и фоновое загрязнение (удалённый источник с равномерными по всей высоте области выбросами, далее «фоновый» источник). В обоих случаях это был объёмный источник, располагающийся рядом с входной для ветра границей области ($x = 0$ м, левая граница на всех картах высот и горизонтальных срезах различных параметров). Источник был вытянут вдоль всей оси Y (координаты $[0, 400]$ м) и имел ширину 8 м вдоль оси X (координаты $[21, 29]$ м по X), геометрический центр источника был расположен в точке $x = 25$ м, $y = 200$ м. В случае уличного источника аэрозоли выбрасывались равномерно в слое от земли до высоты 4 м (координаты $[0, 4]$ м по Z), в случае фонового источника – равномерно по всей высоте области. Эмиссия частиц проводилась равномерно по времени в течение интервала $[1, 6]$ часов от начала эксперимента (то есть начиная с конца фазы адаптации течения), за весь расчёт для одного типа аэрозолей запускалось 20 миллионов лагранжевых частиц. Все приведённые далее концентрации выражены в ненормированных единицах – числе модельных частиц на кубический метр, однако они легко могут быть масштабированы для соответствия аналогичному по постановке источнику определённой интенсивности (например, реальной интенсивности выбросов для определённой улицы).

На входной ($x = 0$ м, левая) и выходной ($x = 400$ м, правая) границах области для частиц были установлены проницаемые границы (при вылете за них частицы исчезали), на боковых границах ($y = 0$ м и $y = 400$ м) – периодические. Для частиц из уличного источника верхняя граница расчётной области была проницаемой для частиц, а нижняя вместе со зданиями рассматривалась как твёрдая поверхность. В случае фонового источника верхняя граница была непроницаемой (частицы отскакивали от неё) для соблюдения условия нулевого потока частиц и отсутствия градиента концентрации на границе.

Для всех типов частиц в данной серии экспериментов были заданы общие параметры взаимодействия с поверхностью: вероятность осаждения при столкновении с поверхностью принята равной $P_h = 0.9 = 90\%$ для горизонтальных поверхностей (земля, крыши) и $P_v =$

0.5 = 50% для вертикальных (стены зданий). Время жизни всех частиц считалось бесконечным (распад не учитывался).

В качестве стохастической модели для частиц использовалась модель случайных смещений (RDM). В LES-модели с высоким разрешением (1 м) подсеточный коэффициент турбулентной диффузии K_s , используемый в стохастической модели RDM, существует лишь в узком слое вблизи поверхностей и в области сдвига скорости на уровне крыш зданий – основная часть турбулентного переноса частиц обеспечивается явно разрешённой пульсационной составляющей потока.

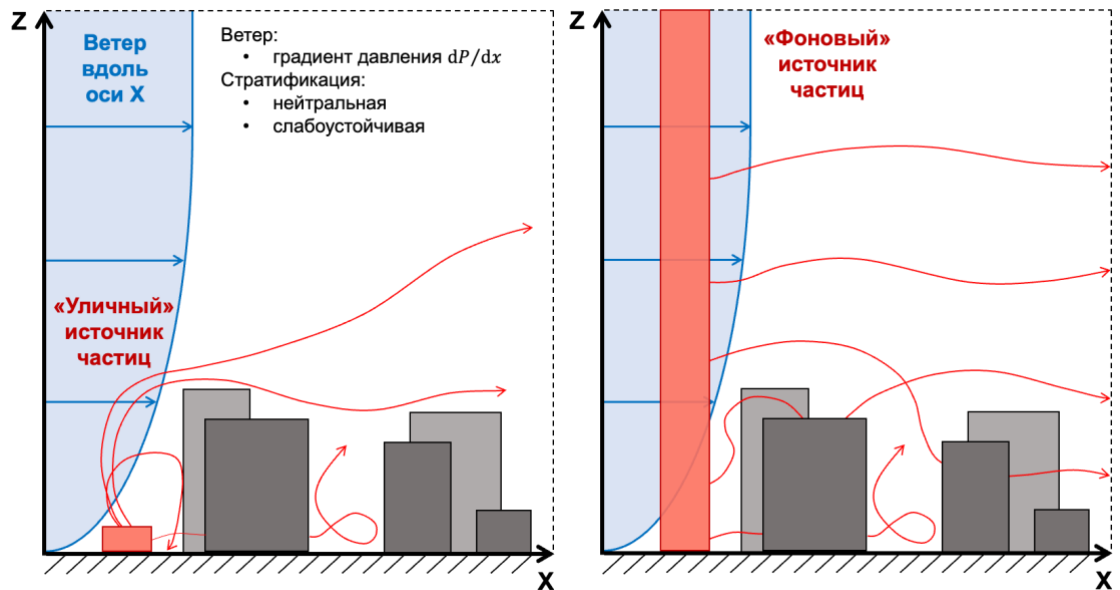


Рисунок 3.11. Схема постановки численных экспериментов, слева для «уличного» (приповерхностного) источника частиц, справа для «фоновый» (удалённого источника с равномерными концентрациями по всей высоте области).

3.3 Влияние городской застройки на структуру воздушного потока и характеристики турбулентности

Структура воздушного потока и интенсивность турбулентности являются определяющими факторами для переноса и рассеяния аэрозолей. На рисунках 3.12-3.16 на основе анализа проведённых модельных расчётов показано, как различные конфигурации застройки влияют на эти характеристики.

На рисунке 3.12 представлены поля модуля средней скорости ветра в приповерхностном слое (0-4 м, на «пешеходном» уровне). Для регулярных конфигураций (рис. 3.12а) чётко прослеживается решающее влияние ориентации зданий и каньонов. В конфигурациях типа «b» с каньонами, параллельными ветру (средний ряд), формируются «каналы» с повышенной

скоростью, способствующие адвективному выносу примеси вдоль улиц. В конфигурациях «а» и «с» (верхний и нижний ряды) скорость ветра внутри застройки значительно ниже из-за блокирующего эффекта зданий: на примере конфигураций «а» и «б» заметно, что поворот каньона на 90° приводит к изменению средней скорости ветра в 1.5-2 раза. Для рандомизированных конфигураций (рис. 3.12б) картина поля скорости более неоднородна. Отсутствие сквозных каналов приводит к общему снижению средней скорости ветра внутри застройки и образованию множества зон застоя, расположенных преимущественно в подветренных частях кварталов и в углах между зданиями различной ориентации.

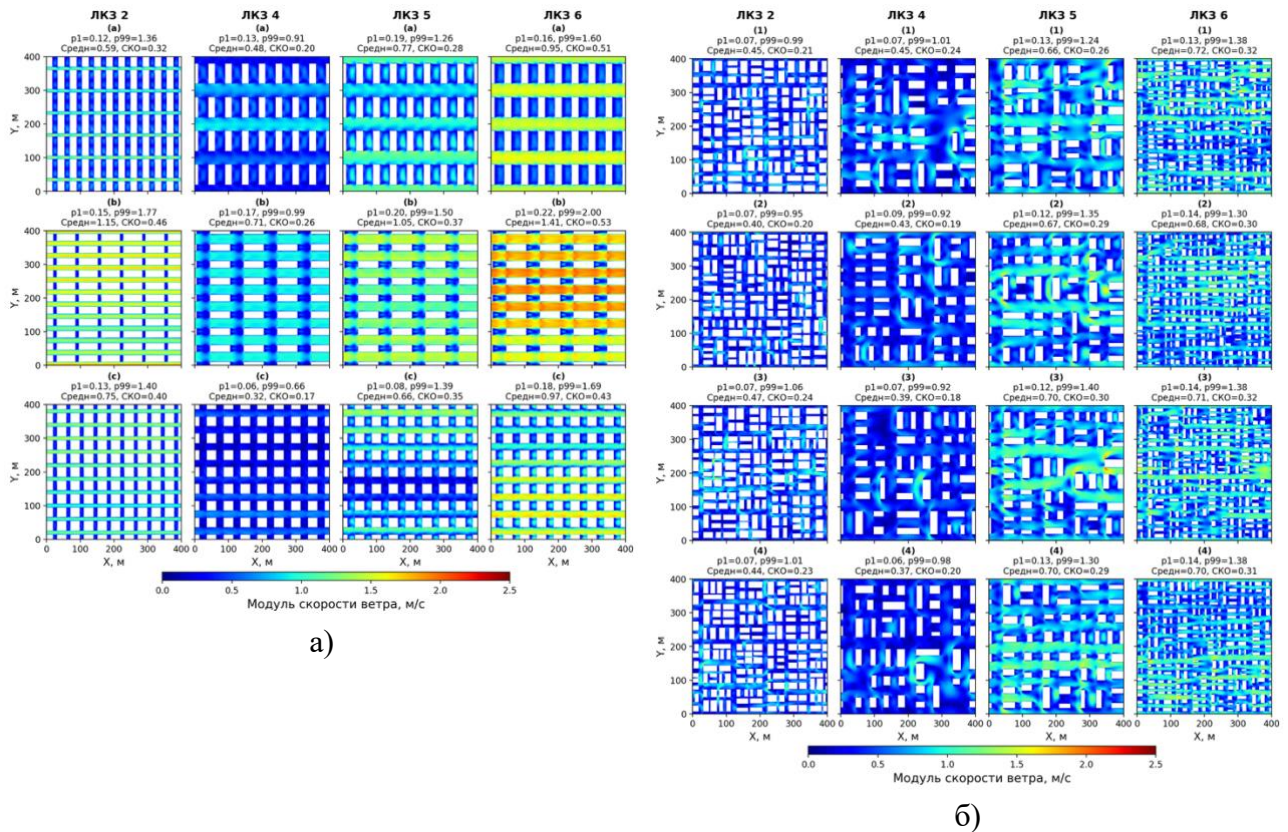


Рисунок 3.12. Поля модуля средней скорости в слое 0-4 м для регулярных (а) и рандомизированных (б) конфигураций при нейтральной стратификации. Здесь и далее столбцы – типы ЛКЗ, строки – отдельные конфигурации для каждого типа ЛКЗ.

На рисунке 3.13 поля модуля средней скорости ветра показаны для реальной застройки. Заметно образование «каналов» вдоль крупных улиц, локальных усилений ветра в узких разрывах между зданиями и многочисленных зон застоя во дворах и у подветренных стен крупных строений. В среднем наибольшие скорости наблюдаются в самой низкой застройке, ЛКЗ 6, а самый слабый ветер – в конфигурациях застройки с большой средней высотой (ЛКЗ 4) или высокой плотностью (ЛКЗ 2). Наименьшая средняя скорость среди всех конфигураций наблюдается в ЛКЗ 4 «г1», что связано с наличием очень высоких регулярных зданий,

расположенных перпендикулярно направлению ветра. Наибольшие скорости соответствуют ЛКЗ 6 «t4»: эта конфигурация имеет одни из самых низких значений средней высоты и плотности застройки, что делает её отлично продуваемой.

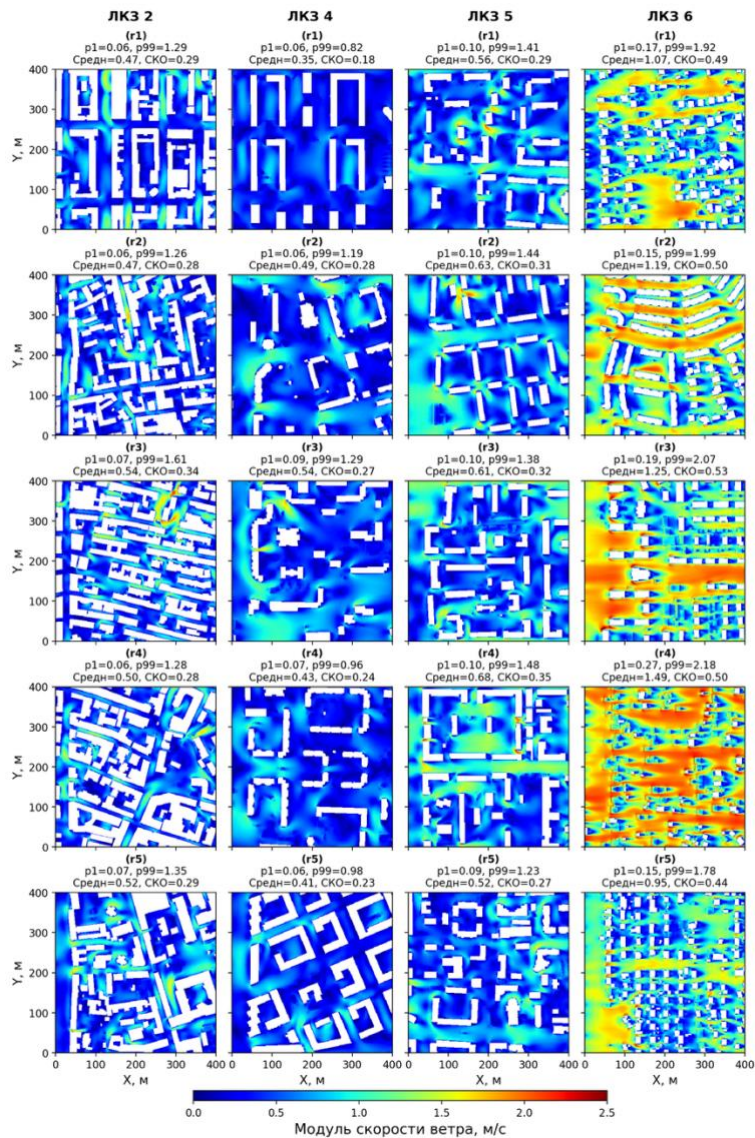


Рисунок 3.13. Поля модуля средней скорости в слое 0-4 м для реальных конфигураций застройки при нейтральной стратификации.

На рисунке 3.14 представлены вертикальные профили усреднённой по горизонтали скорости ветра U (компоненты скорости ветра вдоль оси X). Для всех типов застройки наблюдается ожидаемая и характерная картина: значительное торможение потока внутри городского полога (ниже средней высоты зданий) и резкое увеличение скорости ветра над крышами. Заметно, что рандомизированные и реальные конфигурации дают более сглаженный профиль из-за разброса высот зданий, однако скорость ветра внутри застройки для них в среднем чуть ниже, чем для регулярных, из-за отсутствия сквозной вентиляции. Для

регулярных конфигураций, напротив, профиль имеет более резкий «излом» на уровне крыш, отражающий концентрацию сдвига скорости в узком слое – следствие практически дискретного перехода между двумя режимами течения (внутри полога и над ним) при одинаковой высоте всех зданий. Для наглядности профили приведены как для абсолютных высот (рис. 3.14а), так и для относительных высот с нормированием на среднюю высоту зданий – такое нормирование позволяет наглядно сравнивать между собой конфигурации застройки с разными высотами (рис. 3.14б).

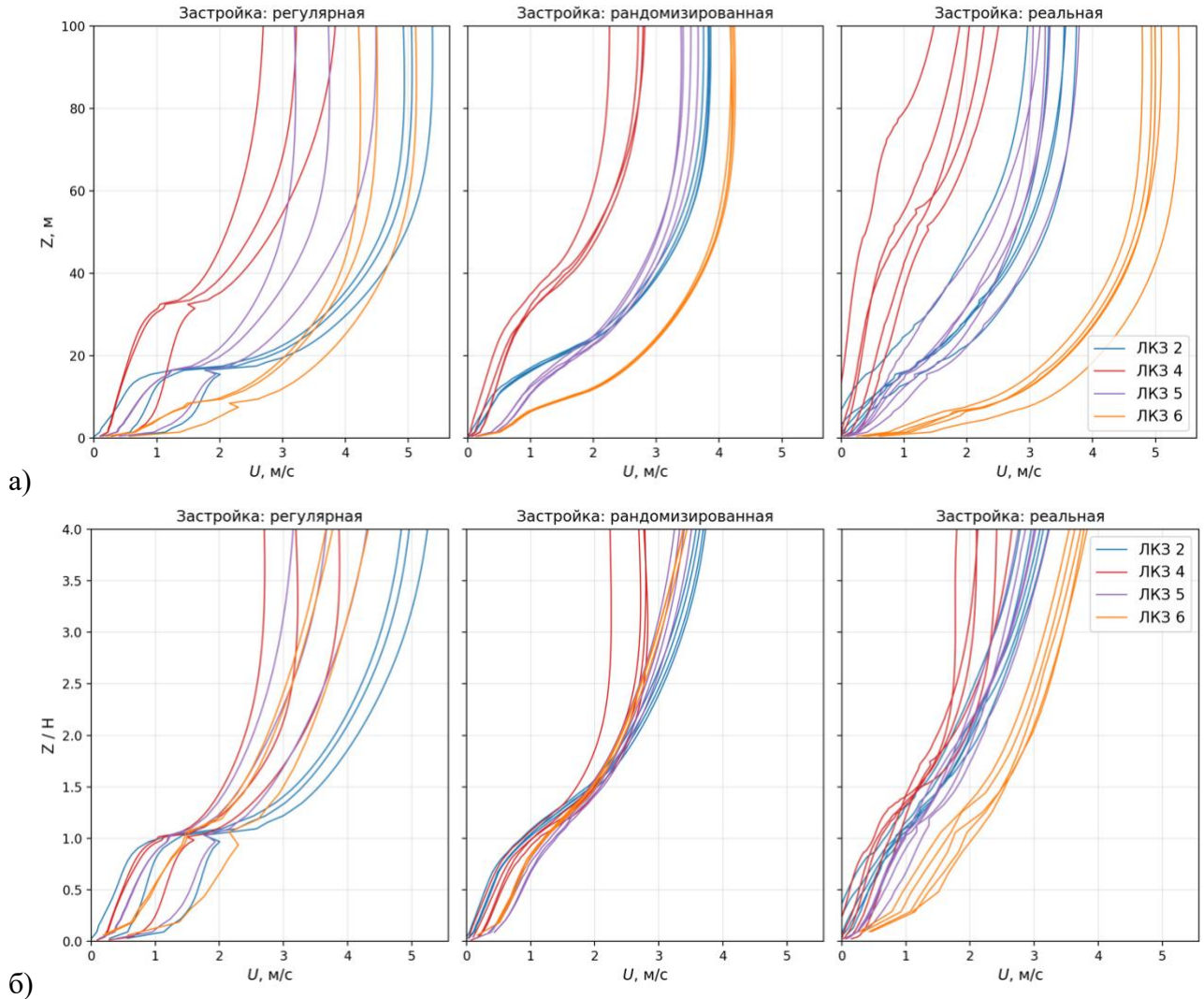


Рисунок 3.14. Вертикальные профили средней скорости ветра U для всех конфигураций с разделением по типам застройки (слева – регулярные, по центру – рандомизированные, справа – реальные). Цвета соответствуют разным типам ЛКЗ. По вертикали абсолютные высоты (а) и относительные высоты с нормированием на среднюю высоту зданий для каждой конфигурации (б).

Существенное влияние на дисперсию аэрозолей может оказывать температурная стратификация. На рисунке 3.15 представлены вертикальные профили осреднённой по горизонтали потенциальной температуры. При нейтральной стратификации (правая часть рис. 3.15) в большей части области температура постоянна по высоте, а незначительное падение с высотой внутри городского полога обусловлено наличием малого положительного потока тепла. В случае слабоустойчивой стратификации (левая часть рис. 3.15) картина меняется кардинально: внутри городского полога формируется выраженная приземная инверсия. Интенсивность этой инверсии напрямую зависит от морфологии застройки: в низкой застройке (ЛКЗ 6) она слабее за счёт близости зоны большого сдвига ветра на уровне крыш и более активного вертикального перемешивания, тогда как в высокой застройке (ЛКЗ 4) происходит эффективное «запирание» выхоложенного воздуха внутри городского полога, что усиливает стабилизацию и способствует накоплению аэрозолей в воздухе вблизи источника.

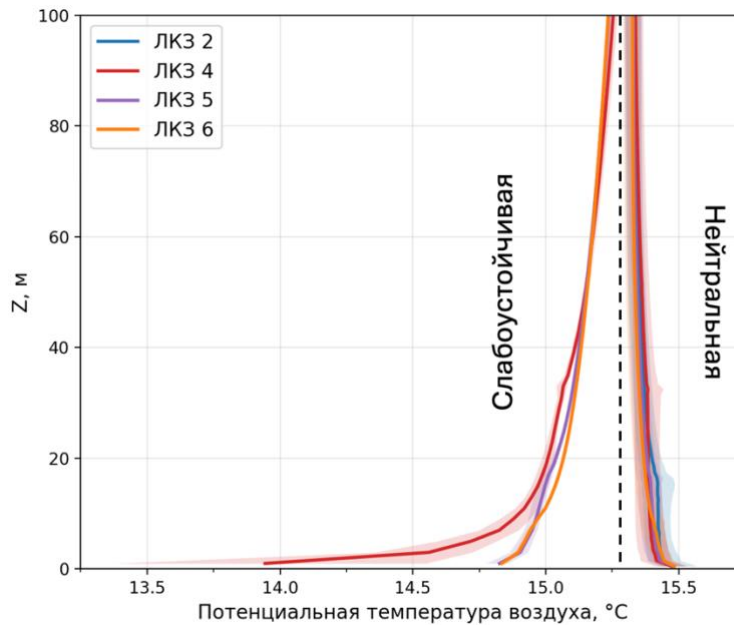


Рисунок 3.15. Вертикальные профили средней потенциальной температуры для каждого типа ЛКЗ (в среднем по его конфигурациям) для нейтральной (справа) и слабоустойчивой (слева) стратификации. Закрашенные области – диапазон по отдельным конфигурациям каждой ЛКЗ.

Изменение термического режима оказывает прямое воздействие на интенсивность турбулентности. Сравнение профилей турбулентной кинетической энергии (ТКЭ) на рисунке 3.16 показывает, что хотя общая форма профилей сохраняется, слабоустойчивая стратификация приводит к заметному подавлению турбулентности в нижнем слое (рис. 3.16б). Наибольшие различия наблюдаются для высокой застройки (ЛКЗ 4), где значения ТКЭ у

поверхности падают примерно в 2 раза по сравнению с нейтральным случаем. Для низкой застройки (ЛКЗ 6) эффект выражен слабее вследствие того, что генерируемая сдвигом ветра на уровне крыш механическая турбулентность проникает практически до земли. В целом внутри полога наблюдается уменьшение ТКЭ в слабоустойчивой стратификации для всех типов ЛКЗ. Такое ослабление турбулентного обмена при увеличении устойчивости создает предпосылки для накопления более высоких концентраций примеси, особенно в глубоких каньонах.

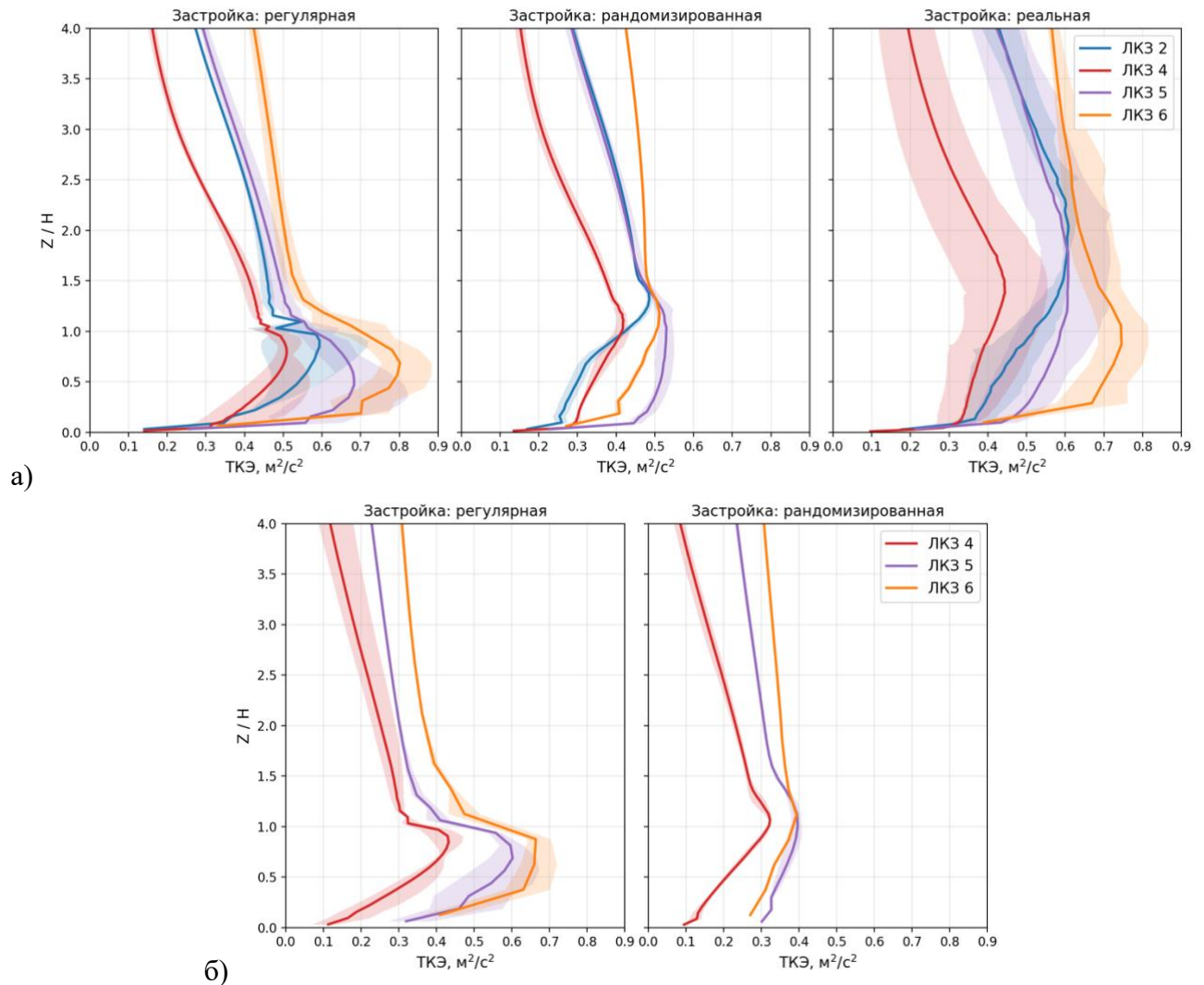


Рисунок 3.16. Вертикальные профили средней ТКЭ для каждого типа ЛКЗ (в среднем по его конфигурациям) для нейтральной (а) и слабоустойчивой (б) стратификации. Закрашенные области – диапазон по отдельным конфигурациям каждой ЛКЗ.

3.4 Закономерности пространственного распределения мелкодисперсных частиц (PM_{2.5})

В данном разделе анализируется пространственное распределение типа частиц, представляющего фракцию PM_{2.5}, репрезентативную для изучения общего характера переноса пассивной аэрозольной примеси. Также проводится оценка связи пространственного распределения данного типа частиц с ЛКЗ и отдельными морфометрическими параметрами застройки.

На рисунке 3.17 показаны поля средней концентрации в слое 0-4 м (в приповерхностном слое, или на «пешеходном» уровне) для регулярных и рандомизированных конфигураций застройки. Распределение загрязнителя согласуется с полем скорости ветра.

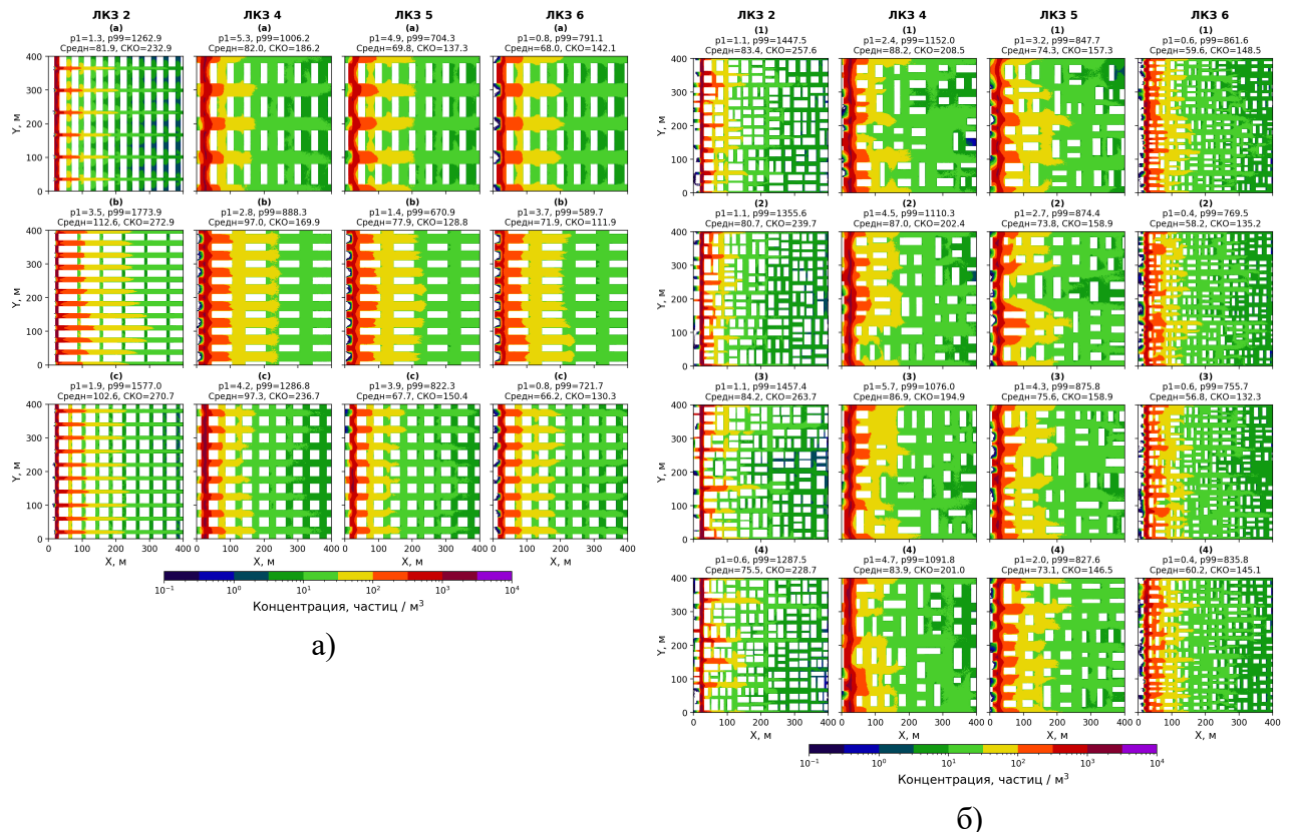


Рисунок 3.17. Поля средней концентрации частиц PM_{2.5} в слое 0-4 м для регулярных (а) и рандомизированных конфигураций (б) для локального уличного источника при нейтральной стратификации

В регулярных конфигурациях (рис. 3.17а), особенно в вариантах «б», частицы эффективно выносятся преимущественно по горизонтали вдоль уличных каньонов, формируя вытянутые шлейфы с относительно медленным спадом концентрации вдоль направления ветра. В вариантах «а» и «с» блокирующий эффект зданий приводит к накоплению частиц и

более высоким локальным концентрациям вблизи источника, однако по этой же причине на удалении от источника заметны значения ниже, чем в продольных каньонах варианта «b»: при перпендикулярной ориентации зданий горизонтальный вынос ослаблен, и существенная доля частиц поднимается над пологом, после чего разбавляется в более интенсивно перемешиваемом слое над крышами. В рандомизированных конфигурациях (рис. 3.17б) шлейф имеет более сложную структуру: активно работают одновременно и горизонтальный перенос вдоль уже не таких прямых и ровных, но всё ещё выраженных улиц, и вертикальное перемешивание, вызванное неоднородностью высот и положения зданий [Varentsov et al., 2025]. В целом значения концентраций для обоих типов застройки имеют схожие порядки.

На рисунке 3.18 показаны поля средней концентрации в слое 0-4 м для реальных конфигураций застройки. Хорошо заметно, что на открытых пространствах и в низкой застройке активен горизонтальный перенос частиц, приводящий к высоким концентрациям в таких зонах и далее за ними по ветру. Наличие крупных зданий, вытянутых перпендикулярно ветру, способствует образованию во дворах за ними зон с более чистым воздухом и росту концентраций на наветренных сторонах зданий. По сравнению с регулярными и рандомизированными конфигурациями, поля реальной застройки демонстрируют наибольшую сложность пространственного распределения: одновременно сосуществуют локальные «каналы» вдоль улиц с повышенным выносом примеси, тупиковые карманы во внутривидовых пространствах, где формируются устойчивые зоны накопления, и наветренные максимумы концентрации перед крупными зданиями. Структура шлейфа в реальной застройке сочетает в себе черты, наблюдавшиеся в идеализированных конфигурациях, но в существенно неоднородном пространственном распределении, не сводимом к одному характерному паттерну в пределах одного типа ЛКЗ.

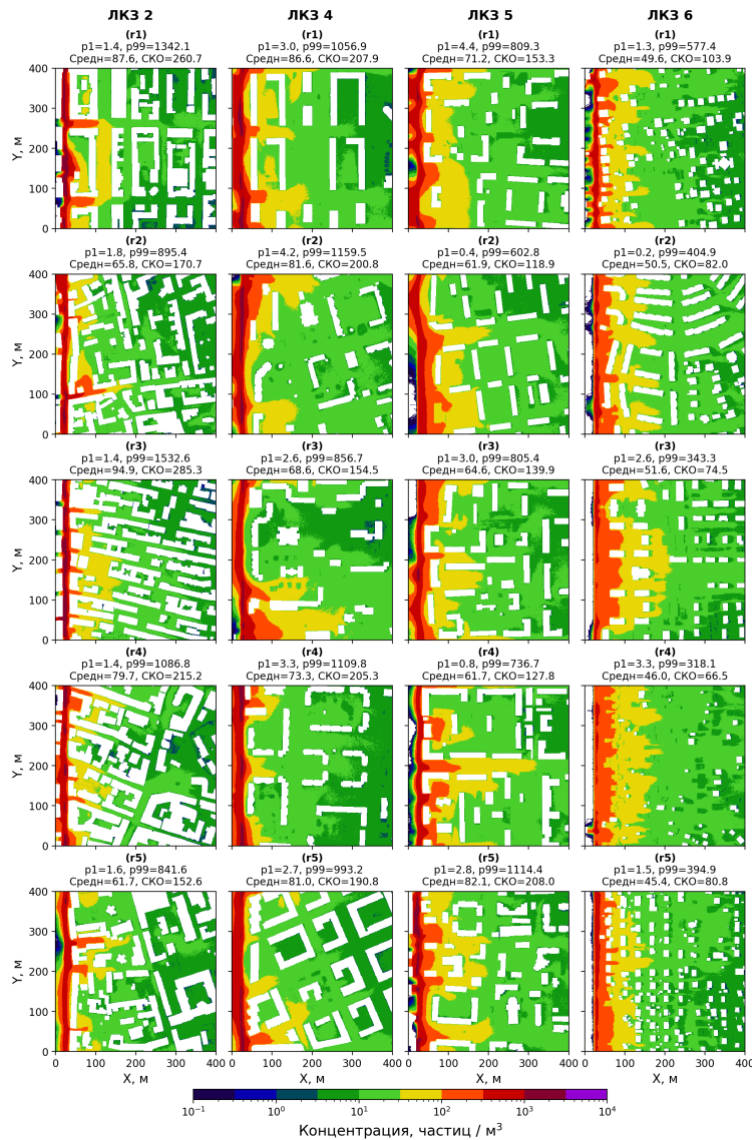


Рисунок 3.18. Поля средней концентрации частиц $PM_{2.5}$ в слое 0-4 м для реальных конфигураций для локального уличного источника при нейтральной стратификации.

Вертикальная структура шлейфа для реальных конфигураций показана на рисунке 3.19 в виде осреднённых вдоль оси Y (перпендикулярно направлению ветра) полей концентрации. Такое осреднение сглаживает локальные флуктуации, связанные с положением отдельных зданий, и позволяет рассмотреть общие закономерности переноса на масштабе всей области. Прослеживается, что вид шлейфа, и особенно его высота, сильно зависят от геометрии застройки и характеристик воздушного течения в непосредственной близости от источника.

Особо выделяется конфигурация ЛКЗ 4 «r1»: из-за наибольшей средней высоты застройки и наличия крупных зданий, расположенных непосредственно у источника перпендикулярно ветру, в этой конфигурации наблюдаются самое сильное вертикальное перемешивание и значимые концентрации на наибольших высотах – поток вынужден

переваливать через высокий «барьер» застройки, что эффективно поднимает примесь над городским пологом. На противоположном полюсе находятся конфигурации ЛКЗ 6 с малоэтажной застройкой: шлейф в них остаётся преимущественно приповерхностным, частицы редко поднимаются выше 1-2 средних высот зданий, что приводит к высоким приповерхностным концентрациям на значительном удалении от источника. Конфигурации ЛКЗ 4 и 5 с разной геометрией демонстрируют промежуточные между этими крайними случаями структуры с разной долей вертикального выноса примеси. При одинаковой высоте (ЛКЗ 2 и 5) в случае ЛКЗ 2 максимум концентрации смещается выше на удалении от источника, так как внутри плотной застройки с узкими и глубокими каньонами затруднены и горизонтальная адвекция, и проникновение частиц вниз из слоя над городским пологом. В целом видно, что формы шлейфа схожи внутри одного типа ЛКЗ, но могут значительно варьироваться в зависимости от конкретного расположения и высоты зданий, особенно вблизи источника.

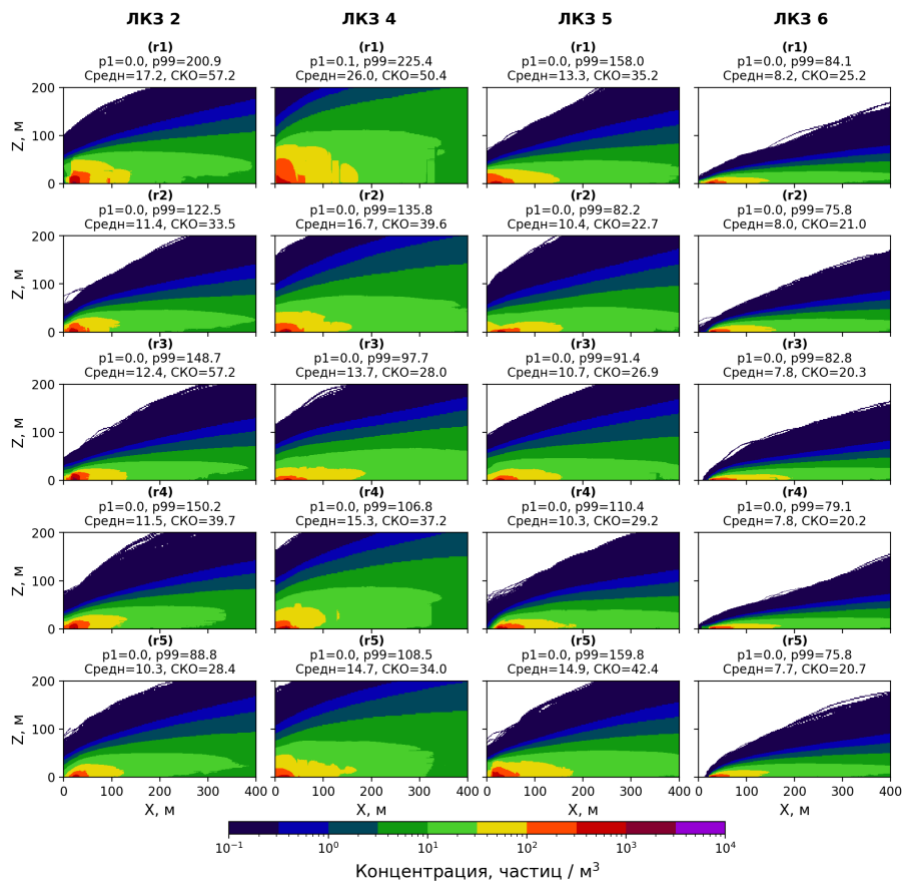


Рисунок 3.19. Поля средней вдоль оси Y концентрации частиц $PM_{2.5}$ для реальных конфигураций для локального уличного источника при нейтральной стратификации.

После анализа полей концентрации перейдём к их количественному обобщению через вертикальные профили. Поскольку основной интерес представляет перенос примеси на масштабе всей территории (а не локальные эффекты непосредственной близости источника), для расчёта вертикальных профилей использовалась дальняя от источника половина расчётной области, координаты [200, 400] м по оси X (на картах высот и горизонтальных срезах это соответствует правой половине области). Такой выбор позволяет характеризовать сформировавшийся шлейф уже после прохождения через значительную часть рассматриваемого городского массива и оценивать его средние свойства после длительного взаимодействия с застройкой.

На рисунке 3.20 представлены вертикальные профили концентрации $PM_{2.5}$, осреднённые по дальней от источника половине области, отдельно для уличного (рис. 3.20а) и фоновых (рис. 3.20б) источников. Картина существенно различается в зависимости от способа задания эмиссии.

Для уличного источника (рис. 3.20а) выше уровня крыш различия между типами ЛКЗ заметны во всех типах застройки – регулярной, рандомизированной и реальной – и проявляются в основном через высоту и протяжённость «хвоста» концентрации в слое над пологом (характер и скорость изменения концентрации с высотой). Однако ниже уровня крыш картина принципиально отличается. В регулярной застройке внутри каждого типа ЛКЗ наблюдается значительный разброс между конфигурациями «а», «б» и «с», обусловленный их ориентацией относительно ветра; при этом разница между средними по разным ЛКЗ профилями практически теряется на фоне этого внутриклассового разброса. В рандомизированной застройке, напротив, внутриклассовый разброс (между конфигурациями одной ЛКЗ) заметно меньше, и различие между типами ЛКЗ внутри полога чётко прослеживается: тип ЛКЗ становится определяющим фактором приповерхностной концентрации и содержания частиц в слое полога (ниже крыш). В реальной застройке наблюдается промежуточная картина: разница между ЛКЗ внутри полога просматривается, но выражена слабее, чем в рандомизированной застройке, а также сопровождается заметным разбросом внутри каждого типа ЛКЗ.

Для фоновых источников (рис. 3.20б) разница между типами ЛКЗ видна во всех слоях – и внутри полога, и над ним. Качественная закономерность та же, что и для уличного источника: наиболее чёткое разделение по ЛКЗ – в рандомизированной застройке, наименее чёткое – в регулярной, в реальной – промежуточная ситуация. Такое поведение объясняется тем, что при фоновом источнике с равномерной по высоте концентрацией на входе профиль в дальней части

области отражает интегральное взаимодействие потока с городским пологом, а не локальную геометрию вблизи источника, что снижает зависимость от конкретного расположения отдельных зданий и каньонов.

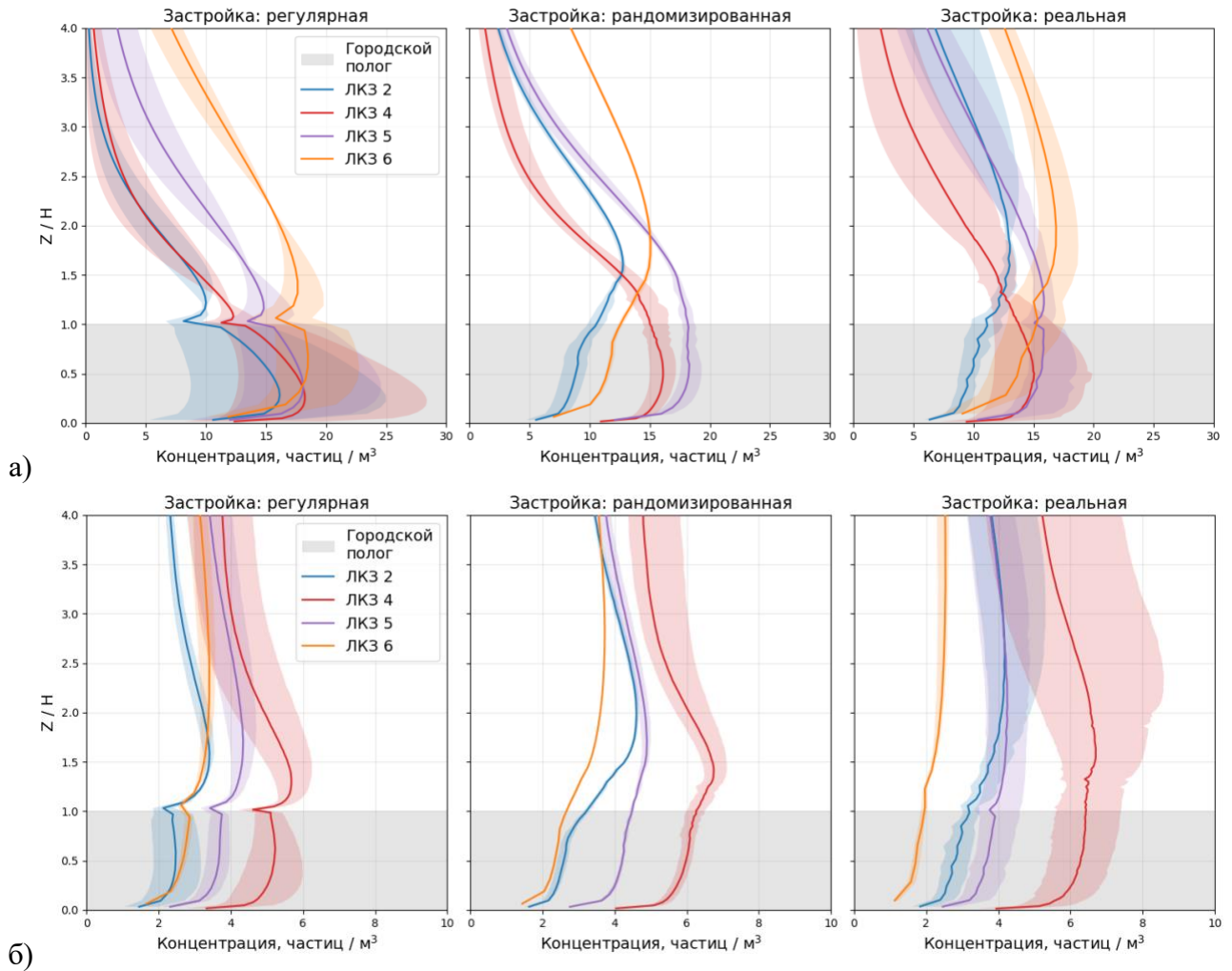


Рисунок 3.20. Вертикальные профили средней концентрации частиц $PM_{2.5}$ для уличного (а) и для фоновый (б) источника при нейтральной стратификации. Осреднение концентраций производилось по дальней от источника половине области (координаты $[200, 400]$ м по X).

Полученные качественные наблюдения о соотношении внутриклассовой (внутри одной ЛКЗ) и межклассовой (между разными ЛКЗ) изменчивости концентраций можно перевести в количественные оценки. Для этого для каждого типа застройки (регулярной, рандомизированной, реальной) и каждой высоты z был рассчитан коэффициент вариации (КВ) среднего вертикального профиля концентрации между конфигурациями одного типа ЛКЗ:

$$KB(z) = \frac{\sqrt{\frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} (C_i(z) - \bar{C}(z))^2}}{\bar{C}(z)}, \quad (3.7)$$

где $KV(z)$ – коэффициент вариации на высоте z , N_c – число конфигураций для данного типа застройки (3 для регулярной, 4 для рандомизированной, 5 для реальной), $C_i(z)$ – средняя концентрация на высоте z для i -ой конфигурации данного типа, $\bar{C}(z)$ – средняя концентрация на высоте z для всех конфигураций этого типа (арифметическое среднее по i). Эта величина характеризует внутриклассовую изменчивость концентрации – разброс между конфигурациями одной и той же ЛКЗ (и в данном случае одного типа застройки).

Аналогично рассчитывалась межклассовая изменчивость – разброс между средними профилями для разных ЛКЗ при фиксированном типе застройки: в формуле (3.7) вместо $C_i(z)$ подставлялись $\bar{C}_j(z)$ – средние вертикальные профили концентрации для каждой ЛКЗ j при выбранном способе генерации, вместо $\bar{C}(z)$ – средняя концентрация на высоте z для данного способа генерации (по типам ЛКЗ), вместо N_c – число типов ЛКЗ. Сопоставление внутриклассового и межклассового коэффициентов вариации позволяет количественно ответить на вопрос, какой фактор сильнее влияет на разброс концентраций: принадлежность к определённому типу ЛКЗ или индивидуальная геометрия конкретной конфигурации внутри типа.

На рисунке 3.21 показаны вертикальные профили обоих коэффициентов вариации, сплошными цветными линиями – внутриклассовой изменчивости (по конфигурациям одной ЛКЗ), пунктирными чёрными – межклассовой (между ЛКЗ). В углах каждой панели приведено отношение межклассовой изменчивости к внутриклассовой, осреднённое отдельно для слоя над пологом (правый верхний угол) и для слоя внутри городского полога (правый нижний угол). Значение этого отношения больше единицы означает, что тип ЛКЗ определяет различия концентраций сильнее, чем вариативность геометрии внутри каждого типа, а значения меньше единицы – обратное.

Для уличного источника (рис. 3.21а) межклассовая изменчивость доминирует над внутриклассовой в рандомизированной застройке (отношение существенно больше 1 во всех слоях): здесь, несмотря на случайный характер генерации зданий внутри ячейки, средние морфометрические характеристики типа ЛКЗ контролируют интегральные характеристики переноса. В реальной застройке межклассовая изменчивость лишь немного превышает внутриклассовую и в целом сопоставима с ней по масштабу – то есть тип ЛКЗ и индивидуальная геометрия конфигурации играют сравнимую роль в определении вертикального профиля концентрации, особенно внутри городского полога. В регулярной застройке межклассовая изменчивость, напротив, проигрывает внутриклассовой: ориентация

каньонов относительно ветра (различающая конфигурации «а», «b», «с» внутри одного типа ЛКЗ) формирует разброс концентраций больший, чем сам тип ЛКЗ. Этот результат количественно подтверждает зависимость переноса от морфологии: ЛКЗ хорошо работает как предиктор для рандомизированной застройки и с оговорками применим для реальной, но недостаточен для регулярных структур с выраженной ориентацией каньонов, где определяющим становится фактор анизотропии и конкретное направление ветра.

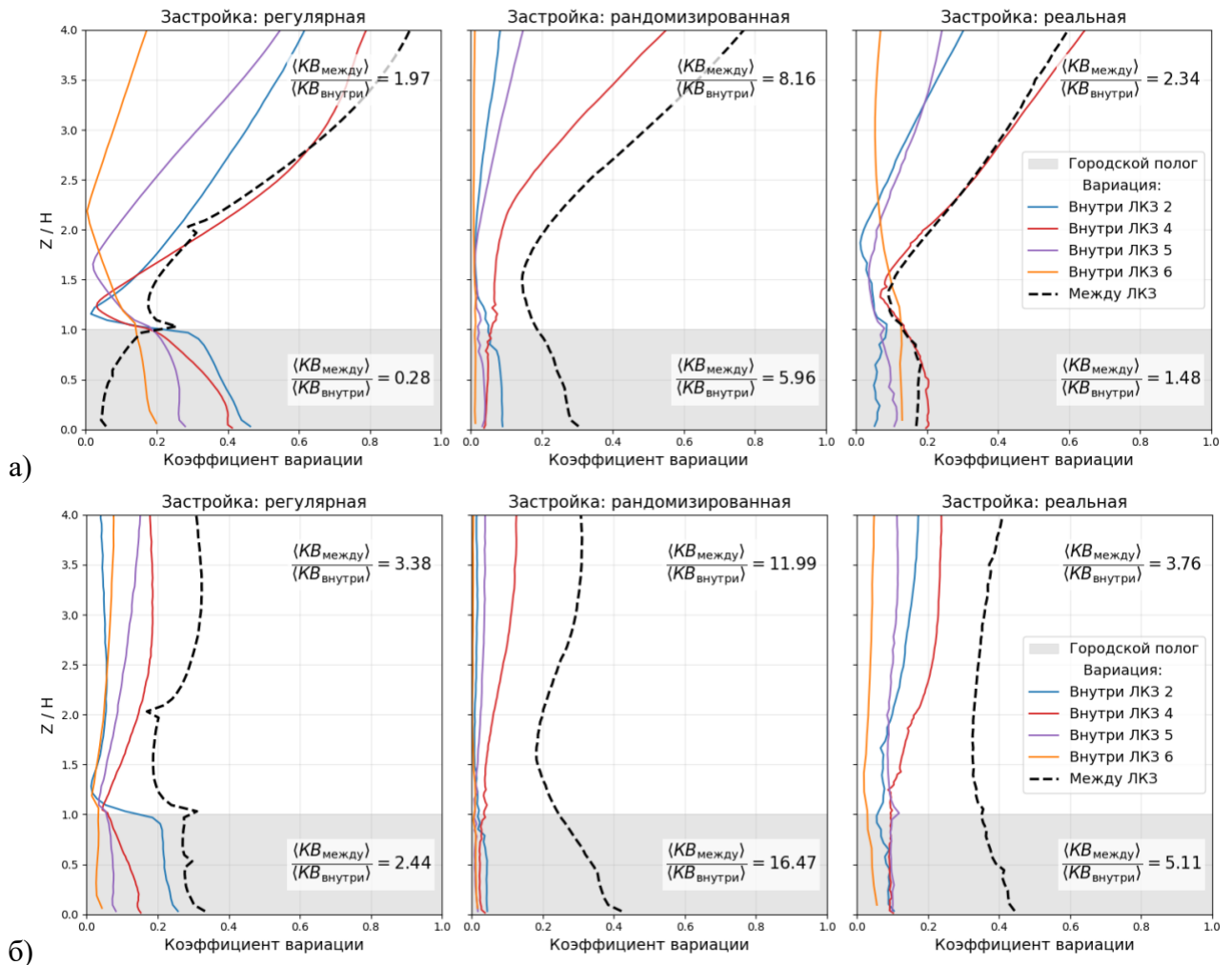


Рисунок 3.21. Вертикальные профили коэффициента вариации концентрации частиц $PM_{2.5}$ для уличного (а) и для фоновых (б) источников при нейтральной стратификации. Сплошные цветные линии показывают масштаб различий внутри типа ЛКЗ (между разными конфигурациями застройки для одной ЛКЗ), пунктирные чёрные – между разными типами ЛКЗ. Значения углов показывают отношения изменчивости между ЛКЗ к изменчивости внутри ЛКЗ для городского полога (снизу справа) и для слоя над пологом (сверху справа).

Для фоновых источников (рис. 3.21б) межклассовая изменчивость доминирует во всех типах застройки, хотя в регулярной – на грани, особенно внутри городского полога.

Качественно это согласуется с наблюдением для рис. 3.20б: при равномерной по высоте эмиссии локальные эффекты ориентации каньонов и положения зданий вблизи источника значительно менее заметны, так как аэрозоли уже перемешаны в пространстве – и очень малая их часть провзаимодействует с конкретным локальным вихрем или каналом. На первый план выходит интегральное взаимодействие потока со всем городским массивом, и тип ЛКЗ восстанавливает свою роль ведущего предиктора. В целом фоновый источник проявляет себя как более «благоприятный» сценарий с точки зрения применимости классификации ЛКЗ для описания переноса.

Рассмотренные выше рисунки и параметры продемонстрировали ряд качественных закономерностей переноса $PM_{2.5}$. Для перехода к дальнейшему количественному анализу необходимо было для каждой конфигурации рассчитать интегральные характеристики пространственного распределения аэрозолей (одно значение на конфигурацию для каждой характеристики). В качестве таких характеристик были выбраны три величины:

- \bar{C}_{0-4m} – средняя концентрация в приповерхностном слое (0–4 м) – характеристика общего уровня загрязнения на «пешеходном» уровне на удалении от источника (осреднение по дальней от источника половине области);

- \bar{C}_H/\bar{C}_{4H} – доля частиц внутри городского полога – отношение числа частиц внутри полога к их числу в слое высотой, равной четырём высотам полога (четырёх средним высотам зданий), служащее мерой того, насколько активно частицы выносятся из полога вверх или, напротив, проникают в полог из вышележащих слоёв (осреднение тоже по дальней от источника половине области);

- k – показатель степенной функции, характеризующий скорость затухания концентрации при удалении от источника вдоль направления ветра.

Величина \bar{C}_H/\bar{C}_{4H} дополнительно полезна как количественная характеристика связи между фоновой концентрацией над застройкой и содержанием частиц в городском пологе – то есть в том слое, где аэрозоли непосредственно воздействуют на жителей.

Горизонтальный профиль концентрации в приповерхностном слое (0-4 м) вдоль направления ветра (вдоль X) может быть аппроксимирован степенной функцией следующего вида:

$$C(\Delta x) = a \cdot \Delta x^k, \quad (3.8)$$

$$C_{2x} = \frac{C(\Delta x)}{C(2 \cdot \Delta x)} = \frac{1}{2^k}, \quad (3.9)$$

где Δx – расстояние от источника по оси X , a – константа, зависящая от начальных условий (интенсивность источника, метеоусловия и др.), k – показатель, характеризующий скорость убывания концентрации с расстоянием от источника. Величина C_{2x} – во сколько раз падает концентрация при удвоении расстояния от источника – является непосредственной производной от k и приводится далее в этой и следующей главах на графиках горизонтальных профилей для наглядности; в качестве количественной характеристики в регрессионном анализе далее используется k .

Поскольку интерес представляет скорость затухания шлейфа на масштабе всей области, а не отдельных зданий, перед аппроксимацией горизонтальный профиль концентрации сглаживался скользящим средним с окном 100 м, что подавляет локальные флуктуации концентрации, особенно в случае строго периодичной застройки, и обеспечивает большую устойчивость оценки показателя k . На рисунке 3.22 в качестве иллюстрации показан пример такой аппроксимации для регулярной конфигурации ЛКЗ 4 «а» при уличном источнике и нейтральной стратификации: исходный горизонтальный профиль концентрации (заметно регулярное чередование полос зданий и каньонов), его сглаженный вариант и аппроксимирующая степенная функция. Качество подгонки степенной модели характеризуется высоким значением коэффициента детерминации R^2 , что подтверждает применимость степенного закона для описания затухания приповерхностной концентрации в дальней зоне шлейфа.

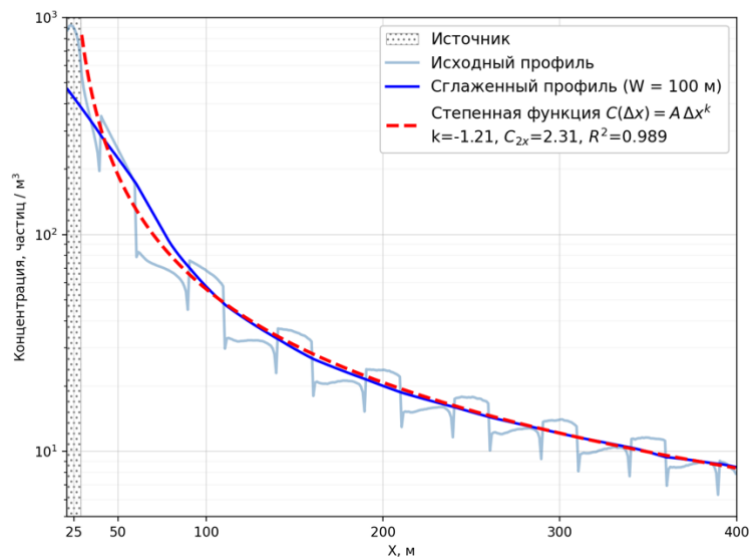


Рисунок 3.22. Горизонтальный профиль концентрации (в слое 0-4 м) для конфигурации ЛКЗ 4 «а» для уличного источника при нейтральной стратификации, его сглаженная форма и аппроксимирующая кривая (степенная функция).

Аналогичные оценки были выполнены для всех 48 конфигураций и для обоих типов источника; показатель k далее анализируется совместно с $\bar{C}_{0-4м}$ и \bar{C}_H/\bar{C}_{4H} как третья интегральная характеристика, связывающая пространственное распределение примеси с морфометрией застройки.

После выбора интегральных характеристик можно оценить, в какой мере тип ЛКЗ объясняет наблюдаемый разброс выбранного параметра между конфигурациями. Ниже такой анализ проводится для приповерхностной концентрации $\bar{C}_{0-4м}$. Внутри каждого типа застройки (регулярной, рандомизированной, реальной) набор значений $\bar{C}_{0-4м}$ был разложен на межклассовую (межгрупповую) и внутриклассовую (внутригрупповую) составляющие дисперсии, где в качестве группирующей переменной выступает тип ЛКЗ. Эта декомпозиция позволяет ответить на вопрос, какая часть наблюдаемой между конфигурациями вариации приповерхностной концентрации объясняется именно принадлежностью к определённому типу ЛКЗ, а какая – индивидуальной геометрией конкретных конфигураций внутри типа.

В качестве количественных мер объяснённой дисперсии использовались две классические статистики из однофакторного дисперсионного анализа: показатель η^2 – отношение межгрупповой суммы квадратов $SS_{\text{между}}$ к полной $SS_{\text{полная}}$, и показатель ω^2 – несмещённая оценка той же доли с коррекцией на число групп и размер выборки:

$$\eta^2 = \frac{SS_{\text{между}}}{SS_{\text{полная}}}, \quad (3.10)$$

$$\omega^2 = \frac{SS_{\text{между}} - (K - 1) MS_{\text{внутри}}}{SS_{\text{полная}} + MS_{\text{внутри}}}, \quad (3.11)$$

где K – число типов ЛКЗ; $MS_{\text{внутри}} = SS_{\text{внутри}}/(N - K)$ – средний квадрат остатков; N – общее число конфигураций в выборке. Значение η^2 лежит в интервале $[0, 1]$ и склонно завышать долю объяснённой дисперсии при малых выборках, тогда как несмещённый показатель ω^2 может принимать в том числе отрицательные значения в ситуациях, когда фактический эффект группирующей переменной (типа ЛКЗ) незначителен и не превышает случайную внутригрупповую вариацию. Совместное использование обеих мер позволяет одновременно оценить наблюдаемую (η^2) и скорректированную (ω^2) долю объяснённой дисперсии и тем самым отличить случаи реального сильного влияния ЛКЗ от случаев, когда наблюдаемый разброс между группами (типами ЛКЗ) сопоставим со случайным разбросом внутри них.

Результаты декомпозиции для $\bar{C}_{0-4м}$ при уличном источнике и нейтральной стратификации приведены на рисунке 3.23. Для регулярной застройки получены значения $\eta^2 =$

0.02 и $\omega^2 = -0.31$. Близкое к нулю η^2 и отрицательное ω^2 количественно подтверждают наблюдение, сделанное по рис. 3.20 и рис. 3.21: внутри регулярной застройки тип ЛКЗ практически не объясняет приповерхностную концентрацию, а наблюдаемые различия между конфигурациями определяются индивидуальной геометрией – прежде всего ориентацией каньонов относительно ветра, различающей варианты «а», «b» и «с». Для рандомизированной застройки получены $\eta^2 = 0.98$ и $\omega^2 = 0.97$ – близкие к единице значения обеих мер означают, что подавляющая часть дисперсии $\bar{C}_{0-4\text{м}}$ между 16 конфигурациями объясняется именно типом ЛКЗ. Внутри одного типа ЛКЗ различные рандомизированные конфигурации дают практически одинаковые приповерхностные концентрации. Для реальной застройки $\eta^2 = 0.59$ и $\omega^2 = 0.50$ – промежуточные значения, отражающие сосуществование двух факторов: тип ЛКЗ задаёт основной уровень концентрации, но индивидуальные особенности геометрии и её ориентации для каждой реальной локации вносят сопоставимый по масштабу вклад в наблюдаемый разброс.

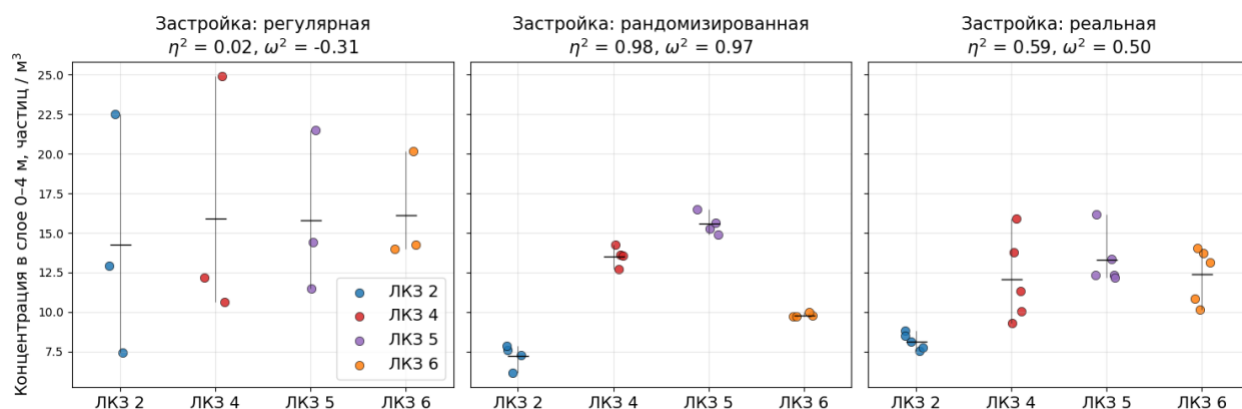


Рисунок 3.23. Разброс приповерхностной концентрации $\bar{C}_{0-4\text{м}}$ внутри типов ЛКЗ, по данным для уличного источника при нейтральной стратификации. Метрики η^2 и ω^2 показывают, какую долю дисперсии концентрации $\bar{C}_{0-4\text{м}}$ между конфигурациями описывает тип ЛКЗ. Горизонтальный разброс точек в пределах одного типа ЛКЗ добавлен в иллюстративных целях для лучшей различимости конфигураций.

Для количественной оценки описательной способности классификации ЛКЗ и отдельных морфометрических параметров застройки в отношении характеристик переноса $\text{PM}_{2.5}$ был выполнен регрессионный анализ. В качестве целевых переменных рассматривались три интегральные характеристики, введённые выше: приповерхностная концентрация $\bar{C}_{0-4\text{м}}$, доля частиц внутри городского полога \bar{C}_H/\bar{C}_{4H} и показатель степенного затухания шлейфа k . В качестве предикторов выступали тип ЛКЗ (как индикаторная переменная) и семь скалярных морфометрических параметров: средняя высота застройки \bar{H} , доля застроенной площади λ_p ,

индекс фронтальной площади λ_f , относительный фронтальный индекс $\tilde{\lambda}_f$, индекс анизотропии A_f , спектральная энтропия поля высот S_H и коэффициент вариации высот застройки CV_H .

Общее уравнение линейной регрессии с одним предиктором имело вид:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon, \quad (3.12)$$

где y – анализируемая характеристика переноса, x – предиктор (скаляр), ε – остаточная ошибка. Тип ЛКЗ как категориальный параметр с K уровнями (количество типов ЛКЗ) представлялся через индикаторные переменные:

$$y = \beta_0 + \alpha_{LCZ} + \varepsilon = \beta_0 + \sum_{j=1}^{K-1} \beta_j 1[\text{ЛКЗ} = j] + \varepsilon, \quad (3.13)$$

где $\alpha_{LCZ} = \sum_{j=1}^{K-1} \beta_j 1[\text{ЛКЗ} = j]$ – категориальный эффект класса ЛКЗ (индикаторные переменные для классов ЛКЗ 4, 5, 6, опорный класс – ЛКЗ 2, эффект которого включён в свободный член β_0), $1[\cdot]$ – индикаторная функция.

Качество подгонки каждой модели характеризовалось скорректированным коэффициентом детерминации:

$$R_{\text{adj}}^2 = 1 - \frac{(1 - R^2)(N - 1)}{N - P - 1}, \quad (3.14)$$

где R^2 – обычный коэффициент детерминации, N – размер выборки (число конфигураций застройки), P – число параметров модели (без свободного члена β_0). Скорректированный R^2 штрафует модели за избыточное число параметров и позволяет корректно сравнивать модели разной сложности, в том числе сравнивать одну категориальную переменную с $K - 1$ степенями свободы (тип ЛКЗ) с одной скалярной переменной (например, с долей застроенной площади λ_p). Необходимо подчеркнуть, что приводимые далее значения R_{adj}^2 рассчитаны на той же выборке, на которой подгонялись модели; они характеризуют долю объяснённой дисперсии в обучающей выборке, а не прогностическое качество модели вне обучающих данных. Оценка устойчивости моделей к удалению отдельных конфигураций рассматривается отдельно ниже.

Результаты регрессионного анализа с одиночными предикторами приведены в таблице 3.4. Регрессии строились как на полной выборке всех 48 конфигураций, так и отдельно на трёх подвыборках, соответствующих регулярному, рандомизированному и реальному типам застройки, что позволяет оценить, насколько универсально или специфично работает каждый предиктор в зависимости от характера застройки.

Таблица 3.4. Скорректированный R^2 моделей линейной регрессии на основе различных предикторов. Метрика – характеристика пространственного распределения аэрозолей, которая описывалась моделью линейной регрессии. Цветовой заливкой фона ячеек от красного (-1) до зелёного (1) показана величина скорректированного R^2 .

Источник	Метрика	Выборка конфигураций	Предиктор						
			ЛКЗ	\bar{H}	λ_p	λ_f	$\tilde{\lambda}_f$	A_f	S_H
Уличный	Концентрация в слое 0-4 м $\bar{C}_{0-4м}$	Все	0.19	-0.02	0.12	0.22	0.29	0.24	0.19
		Рандомизир.	0.97	0.1	0.55	0.21	-0.06	-0.03	0.45
		Реальные	0.51	-0.05	0.47	0.13	0.09	-0.04	-0.04
		Регулярные	-0.35	-0.1	-0.01	0.46	0.6	0.13	-0.1
	Доля частиц внутри полога \bar{C}_H/\bar{C}_{4H}	Все	0.71	0.56	0.13	0	0.04	0.16	0.15
		Рандомизир.	0.93	0.71	0.26	-0.07	-0.04	0.16	0.62
		Реальные	0.9	0.68	0.23	0.14	-0.02	0.27	0.3
		Регулярные	0.34	0.45	0	-0.09	0.26	0.01	-0.08
	Степенной показатель k	Все	0.4	-0.02	0.44	0.26	0.02	0	-0.02
		Рандомизир.	0.96	0.03	0.74	0.34	-0.06	-0.01	0.24
		Реальные	0.64	0.01	0.51	0.27	0.11	-0.02	0.22
		Регулярные	0.18	-0.02	0.41	0.72	0.18	0.22	0.1
Фоновый	Концентрация в слое 0-4 м $\bar{C}_{0-4м}$	Все	0.89	0.8	0.13	0.14	-0.02	0.02	0.01
		Рандомизир.	0.99	0.81	0.2	-0.06	0.08	0.27	0.69
		Реальные	0.94	0.89	0	0.39	0.05	0.22	0.52
		Регулярные	0.75	0.59	0.27	-0.1	-0.03	-0.03	0.15
	Доля частиц внутри полога \bar{C}_H/\bar{C}_{4H}	Все	0.85	0.58	0.4	0.01	-0.02	0.02	-0.02
		Рандомизир.	0.98	0.6	0.45	-0.06	-0.02	0.18	0.48
		Реальные	0.89	0.66	0.31	0.1	-0.02	0.25	0.22
		Регулярные	0.62	0.37	0.42	-0.07	0.06	0.02	0.23
	Степенной показатель k	Все	0.47	0.01	0.51	0.35	0.01	-0.01	-0.01
		Рандомизир.	0.97	-0.05	0.88	0.55	-0.07	-0.04	0.06
		Реальные	0.61	0.12	0.49	0.47	0.11	-0.04	0.21
		Регулярные	0.3	-0.08	0.58	0.58	0.13	0.16	0.25

Анализ таблицы 3.4 позволяет сформулировать несколько важных наблюдений. Во-первых, тип ЛКЗ в целом является сильным предиктором характеристик переноса $PM_{2.5}$: на полной выборке, рандомизированной и реальной подвыборках R^2_{adj} (ЛКЗ) превышает 0.5 для большинства целевых переменных при обоих источниках. Особенно высокие значения наблюдаются для рандомизированной застройки (до 0.99 для приповерхностной концентрации

при фоновом источнике), что согласуется с ранее описанными в данной главе результатами: внутри рандомизированных конфигураций случайная геометрия на масштабе отдельных зданий и каньонов слабо влияет на интегральные характеристики переноса, тип ЛКЗ является ведущим фактором.

Во-вторых, для регулярной застройки ЛКЗ работает слабо: значения R_{adj}^2 для уличного источника отрицательны или близки к нулю для приповерхностной концентрации (-0.35) и показателя k (0.18). В этих условиях наиболее информативными одиночными предикторами оказываются индекс фронтальной площади λ_f ($R_{\text{adj}}^2 = 0.46$ для приповерхностной концентрации, 0.72 для показателя k) и относительный фронтальный индекс $\tilde{\lambda}_f$ ($R_{\text{adj}}^2 = 0.60$ для $\bar{C}_{0-4\text{м}}$). Это подтверждает физический механизм, обсуждавшийся в разделе 3.1: при отсутствии разнообразия высот, форм и положений зданий определяющим фактором становится ориентация каньонов относительно ветра, которая описывается как раз фронтальными индексами.

В-третьих, показатель степенного затухания шлейфа k в целом описывается одиночными предикторами хуже, чем приповерхностная концентрация и доля частиц в пологе: для полной выборки лучшие значения R_{adj}^2 для k почти не превышают 0.5 , тогда как для других целевых переменных достигают $0.7\sim 0.9$. Это согласуется с физической интерпретацией: скорость затухания концентрации с расстоянием от источника во-многом определяется геометрией воздушного потока в непосредственной близости от источника и в начальной зоне шлейфа, и поэтому слабее коррелирует с интегральными морфометрическими параметрами всей конфигурации.

В-четвёртых, среди скалярных морфометрических предикторов после ЛКЗ наибольшую универсальную описательную силу проявляют средняя высота застройки \bar{H} (особенно для доли частиц в пологе и приповерхностной концентрации при фоновом источнике), доля застроенной площади λ_p и индекс фронтальной площади λ_f . Параметры, описывающие внутреннюю структуру застройки (A_f , S_H), по отдельности проявляют себя слабее, но их роль становится заметной в комбинации с ЛКЗ, что будет показано далее. Коэффициент вариации высот зданий CV_H в качестве одиночного предиктора проявил себя хуже остальных рассмотренных параметров и не был добавлен в табл. 3.4.

Полученные результаты позволяют сформулировать гипотезу: классификация ЛКЗ адекватно описывает базовые интегральные различия переноса (определяемые в первую очередь средней высотой и плотностью застройки), но её слабые места –регулярная застройка

с выраженной анизотропией и характеристики приповерхностного распределения аэрозолей ($\bar{C}_{0-4м}$ в случае уличного источника, показатель k) – могут быть частично компенсированы добавлением к ЛКЗ параметров, описывающих эффект от застройки при заданном направлении ветра, её анизотропию и/или внутреннюю структуру. Для проверки этой гипотезы была построена серия моделей, в которых индикаторные переменные ЛКЗ дополнялись одним или несколькими морфометрическими предикторами:

$$\begin{aligned}
 \text{M1:} \quad & y = \beta_0 + \alpha_{LCZ} , \\
 \text{M2a:} \quad & y = \beta_0 + \alpha_{LCZ} + \gamma_1 \lambda_f , \\
 \text{M2б:} \quad & y = \beta_0 + \alpha_{LCZ} + \gamma_1 (\tilde{\lambda}_f - 1) , \\
 \text{M3:} \quad & y = \beta_0 + \alpha_{LCZ} + \gamma_1 (\tilde{\lambda}_f - 1) \cdot A_f / S_H ,
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Модель М1 соответствует «чистой» классификации ЛКЗ и служит базовым уровнем сравнения.

Модель М2а добавляет к ЛКЗ абсолютный индекс фронтальной площади λ_f – эффект и от направления, и от высоты и плотности застройки. Модель М2б заменяет λ_f на отклонение относительного фронтального индекса от среднего по всем румбам ($\tilde{\lambda}_f - 1$), которое равно нулю для изотропной застройки (при любом направлении) и отлично от нуля только при наличии направленности геометрии относительно ветра. Такое представление позволяет модели линейной регрессии «увидеть» переход режима – от каналирования потока вдоль параллельных ветру улиц ($\tilde{\lambda}_f - 1 < 0$) к обтеканию вытянутых перпендикулярных ветру зданий ($\tilde{\lambda}_f - 1 > 0$).

Наконец, модель М3 использует композитный морфометрический предиктор $(\tilde{\lambda}_f - 1) \cdot A_f / S_H$, в котором отклонение фронтального индекса от среднего комбинируется с индексом анизотропии A_f (усиливая вклад направления для выраженной анизотропных конфигураций и наоборот) и делится на спектральную энтропию S_H (усиливая вклад направления и анизотропии для регулярных, упорядоченных конфигураций, в которых анизотропия может достигать более высоких значений). Композит интерпретируется как количественная мера эффекта от ориентации застройки при данном направлении ветра с коррекцией на общую анизотропию и хаотичность/упорядоченность геометрии.

Дополнительно были проверены модели, в которых ЛКЗ дополнялся индексом анизотропии A_f или спектральной энтропией S_H отдельно. Эти модели не давали значительного прироста R_{adj}^2 по сравнению с базовой М1 ни для одной из целевых переменных и в дальнейший анализ не включены. Также были проверены модели, аналогичные М3, но с

коррекцией только на один из параметров (A_f , S_H) – они показали более низкие значения R_{adj}^2 относительно М3, поэтому далее тоже не обсуждаются.

Результаты оценки моделей М1, М2а, М2б, М3 приведены в таблице 3.5 для обоих вариантов источников и трёх целевых переменных. Для каждой комбинации «источник × целевая переменная × подвыборка конфигураций» показаны значения R_{adj}^2 всех четырёх моделей и абсолютный прирост R_{adj}^2 модели М3 относительно М1.

Анализ таблицы 3.5 позволяет сделать несколько содержательных выводов. Во-первых, для рандомизированной застройки базовая модель М1 уже даёт R_{adj}^2 близкий к единице (0.93-0.99) для всех целевых переменных при обоих источниках, и добавление морфометрических предикторов даёт лишь незначительный прирост. Это естественно: внутри рандомизированной застройки конфигурации различаются только реализацией случайной геометрии при одинаковых средних параметрах ЛКЗ, поэтому индивидуальная геометрия не несёт дополнительной информации для прогноза интегральных характеристик переноса.

Во-вторых, наибольший прирост R_{adj}^2 при переходе от М1 к М3 наблюдается именно там, где базовая модель ЛКЗ работала хуже всего – в регулярной застройке. Для приповерхностной концентрации \bar{C}_{0-4m} при уличном источнике в регулярной застройке М1 даёт отрицательное значение (–0.35), М2а: 0.91, М3: 0.71. Для показателя k при уличном источнике М1 даёт 0.18, М2а: 0.78, М3: 0.64. Композит М3 заметно лучше базовой М1, но в этих случаях уступает М2а, что связано с особенностями именно регулярной выборки: при очень близких значениях S_H для всех конфигураций («а», «b», «с») внутри одного типа ЛКЗ нормировка на S_H не даёт дополнительной информации, и М2а с ненормированным параметром λ_f оказывается более эффективной. Тем не менее даже композит М3 устраняет основное слабое место М1 в регулярной застройке.

В-третьих, в реальной застройке М3 даёт умеренный, но устойчивый прирост по сравнению с М1. В целом по реальной застройке модели М2а, М2б и М3 проявляют схожие результаты, и их превосходство над М1 стабильное, но небольшое. Это подтверждает, что в целом тип ЛКЗ уже несёт в себе значительную долю информации, необходимой для описания переноса и пространственного распределения аэрозолей, однако для уточнения описательной способности может быть дополнен характеристиками ориентации и/или внутренней структуры застройки.

Таблица 3.5. Скорректированный R^2 моделей линейной регрессии для характеристик пространственного распределения аэрозолей, по данным для нейтральной стратификации. Модели на основе уравнения (5): M1: $y = f(\text{ЛКЗ})$, M2a: $y = f(\text{ЛКЗ}, \lambda_f)$, M2б: $y = f(\text{ЛКЗ}, \tilde{\lambda}_f)$, M3: $y = f(\text{ЛКЗ}, \tilde{\lambda}_f, A_f, S_H)$. Зелёным выделены лучшие модели в ряду. Оттенками от белого (0) до синего (>1) выделен абсолютный прирост R_{adj}^2 у модели M3 относительно M1.

Источник	Метрика	Выборка конфигураций	Модель				Разница M3 – M1
			M1	M2a	M2б	M3	
Уличный	Концентрация в слое 0-4 м $\bar{C}_{0-4\text{м}}$	Все	0.19	0.48	0.49	0.71	0.52
		Рандомизир.	0.97	0.97	0.98	0.98	0.01
		Реальные	0.51	0.57	0.54	0.53	0.02
		Регулярные	-0.35	0.91	0.46	0.71	1.06
	Доля частиц внутри полога \bar{C}_H/\bar{C}_{4H}	Все	0.71	0.76	0.82	0.87	0.16
		Рандомизир.	0.93	0.94	0.96	0.97	0.04
		Реальные	0.9	0.89	0.89	0.91	0.01
		Регулярные	0.34	0.97	0.76	0.85	0.51
	Степенной показатель k	Все	0.4	0.5	0.42	0.48	0.08
		Рандомизир.	0.96	0.96	0.96	0.96	0
		Реальные	0.64	0.72	0.69	0.71	0.07
		Регулярные	0.18	0.78	0.47	0.64	0.46
Фоновый	Концентрация в слое 0-4 м $\bar{C}_{0-4\text{м}}$	Все	0.89	0.89	0.89	0.89	0
		Рандомизир.	0.99	0.99	0.99	0.99	0
		Реальные	0.94	0.94	0.94	0.95	0.01
		Регулярные	0.75	0.94	0.81	0.86	0.11
	Доля частиц внутри полога \bar{C}_H/\bar{C}_{4H}	Все	0.85	0.85	0.86	0.86	0.01
		Рандомизир.	0.98	0.98	0.99	0.99	0.01
		Реальные	0.89	0.88	0.88	0.9	0.01
		Регулярные	0.62	0.95	0.79	0.85	0.23
	Степенной показатель k	Все	0.47	0.58	0.48	0.51	0.04
		Рандомизир.	0.97	0.98	0.98	0.98	0.01
		Реальные	0.61	0.72	0.62	0.63	0.02
		Регулярные	0.3	0.79	0.53	0.67	0.37

В-четвёртых, на полной выборке всех 48 конфигураций M3 заметно превосходит M1 для приповерхностной концентрации при уличном источнике (0.19 → 0.71, прирост +0.52) и для доли частиц в пологе (0.71 → 0.87, прирост +0.16). Для приповерхностной концентрации при фоновом источнике M1 уже даёт высокий $R_{\text{adj}}^2 = 0.89$, и прирост M3 незначителен. Это

согласуется с физической интерпретацией: фоновый источник, формирующий равномерное по высоте начальное распределение примеси, в меньшей степени зависит от анизотропии и структуры застройки, чем уличный, и поэтому в его случае первоочередную роль играют средние характеристики типа ЛКЗ.

В целом результаты таблицы 3.5 количественно подтверждают, что тип ЛКЗ адекватно описывает базовые различия переноса для рандомизированной и реальной городской застройки, но недостаточен для регулярных структур с выраженной анизотропией. Дополнение ЛКЗ композитным предиктором $(\tilde{\lambda}_f - 1) \cdot A_f / S_H$ – комбинацией отклонения относительного фронтального индекса для конкретного направления от единицы (среднего), индекса анизотропии и спектральной энтропии – позволяет существенно улучшить описание переноса в анизотропных конфигурациях, не ухудшая при этом результаты в изотропных. Тем самым ЛКЗ выступает как удобный базовый предиктор, а добавление морфометрических параметров, описывающих внутреннюю структуру и ориентацию застройки, расширяет применимость подхода на широкий спектр конфигураций.

Для проверки устойчивости результатов и отсутствия перепогонки моделей дополнительно была проведена оценка по схеме LOO-кросс-валидации («leave-one-out»): для каждой конфигурации поочередно она исключалась из обучающей выборки, модель подгонялась на оставшихся конфигурациях и использовалась для прогноза целевой переменной на исключённой конфигурации; по совокупности всех 48 прогнозов рассчитывался показатель LOO- R^2 . Сопоставление R_{adj}^2 (рассчитанного на полной обучающей выборке) и LOO- R^2 позволяет оценить, в какой мере оптимизм оценки R_{adj}^2 обусловлен подгонкой модели на тех же данных, на которых рассчитывается метрика.

Средняя по всем целевым переменным и подвыборкам разница между R_{adj}^2 и LOO- R^2 составила 0.146 для базовой модели М1 и 0.108 для модели М3. Иными словами, добавление морфометрического композита не только не приводит к перепогонке, но напротив, уменьшает разрыв между объяснённой и кросс-валидационно предсказанной дисперсиями. Этот результат объясняется тем, что классификация ЛКЗ как набор дискретных категорий чувствительна к удалению отдельных конфигураций (особенно для малых подвыборок, где удаление одной конфигурации может существенно изменить оценку среднего по группе), тогда как непрерывный композитный предиктор обеспечивает интерполяцию (в пространстве морфометрических предикторов) и стабилизирует модель относительно вариаций обучающей выборки.

Чтобы проверить, насколько выявленные при нейтральной стратификации зависимости устойчивы к смене термического режима, та же схема анализа применена к серии расчётов при слабоустойчивой стратификации. Результаты подгонки моделей M1, M2a, M2б, M3 на этой подвыборке приведены в таблице 3.6. Общая картина сохраняется: M1 хорошо описывает изменчивость $\bar{C}_{0-4м}$, \bar{C}_H/\bar{C}_{4H} и k на рандомизированных конфигурациях и существенно хуже – на регулярных. Существенное отличие проявляется в том, какой именно морфометрический предиктор лучше всего восполняет дефицит M1 для регулярных кварталов: при слабоустойчивой стратификации им неожиданно оказывается спектральная энтропия высот S_H . Соответствующая модель M2в имеет вид:

$$\text{M2в: } y = \beta_0 + \alpha_{LCZ} + \gamma_1 S_H, \quad (3.16)$$

её коэффициенты и качество приведены в таблице 3.6 наряду с M1, M2a, M2б и M3.

Физически это согласуется с тем, что при слабоустойчивой стратификации плавучесть подавляет вертикальное перемешивание, и относительный вклад механической турбулентности, генерируемой на неоднородностях обтекаемых препятствий, возрастает. В этом режиме разнообразие масштабов застройки, в том числе высот зданий, количественно описываемое S_H , становится особенно значимым фактором перемешивания. Результат, однако, следует трактовать с осторожностью: подвыборка регулярных конфигураций здесь – всего 9 случаев, что не позволяет строго различать M2в и альтернативные одиночные добавки, и его следует рассматривать как качественное указание на дополнительный механизм, а не как окончательную рекомендацию предиктора.

Таблица 3.6. Аналогично таблице 3.5, но для слабоустойчивой стратификации и только для уличного источника. Модель M2в: = f(ЛКЗ, S_H). Оттенками от красного (<-1) до синего (>1) выделен абсолютный прирост R_{adj}^2 моделей относительно M1.

Метрика	Выборка конфигураций	Модель					Разница M3 – M1	Разница M2в – M1
		M1	M2a	M2б	M2в	M3		
Концентрация в слое 0-4 м $\bar{C}_{0-4м}$	Рандомизир.	0.94	0.96	0.95	0.93	0.95	0.01	-0.01
	Регулярные	0.18	0.37	0.2	0.76	0.36	0.18	0.58
Доля частиц внутри полога \bar{C}_H/\bar{C}_{4H}	Рандомизир.	0.98	0.99	0.99	0.97	0.99	0.01	-0.01
	Регулярные	0.7	0.95	0.89	0.71	0.92	0.22	0.01
Степенной показатель k	Рандомизир.	0.87	0.87	0.9	0.86	0.91	0.04	-0.01
	Регулярные	-0.03	0.11	-0.19	0.77	-0.07	-0.04	0.8

В целом анализ слабоустойчивой постановки подтверждает основные выводы данного раздела. Во-первых, важность зависящих от направления ветра параметров для регулярной анизотропной застройки и интегральных изотропных параметров для хаотичной застройки. Во-вторых – ЛКЗ образует полезный базовый слой описания (предиктор), который для упорядоченной геометрии следует дополнять дополнительными морфометрическими характеристиками, причём базовое качество описания и конкретный выбор дополнительных параметров могут зависеть от термического режима.

3.5 Чувствительность полученных зависимостей к массе и размеру частиц

В предыдущем разделе главы анализ строился на одном типе частиц – представителе фракции $PM_{2.5}$ (диаметр 0.8 мкм, плотность 1650 кг/м^3 , скорость гравитационного оседания $3.2 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$). Чтобы оценить, насколько полученные выводы о связи параметров аэрозольного загрязнения с типом ЛКЗ и морфометрией застройки переносятся на другие аэрозольные фракции, аналогичный анализ численных экспериментов в нейтральной стратификации проведён для всех пяти типов частиц, перечисленных в таблице 3.3: UFP (0.05 мкм), $PM_{2.5}$ (0.8 мкм), PM_{10} (5 мкм), пыльца (22 мкм) и крупная пыль (50 мкм). Все остальные параметры постановки аналогичны. Далее рассматриваются результаты только для уличного источника.

На рисунке 3.24 приведены вертикальные профили средней концентрации разных типов частиц в дальней от источника половине области – в среднем по всем 48 конфигурациям застройки (рис. 3.24а) и отдельно по типам генерации (рис. 3.24б). Профили UFP и $PM_{2.5}$ практически идентичны во всём диапазоне высот: для частиц с диаметром меньше нескольких микрометров скорость оседания пренебрежимо мала по сравнению со скоростями вертикальных пульсаций в городском пограничном слое, и их перенос полностью определяется геометрией течения и турбулентной диффузией. Профиль PM_{10} отличается от $PM_{2.5}$ слабо и на грани различимого – гравитационное оседание для этой фракции ещё не становится определяющим процессом при нейтральной стратификации. Пыльца (22 мкм) уже даёт заметно меньшие концентрации на всех высотах, особенно в верхней части городского пологоа и над ним: оседание начинает конкурировать с турбулентным выносом. Крупная пыль (50 мкм) за счёт быстрого гравитационного оседания имеет концентрации на порядок ниже на всех высотах. Качественная картина различий между профилями концентрации разных типов частиц сохраняется для всех способов генерации застройки (регулярные, рандомизированные, реальные).

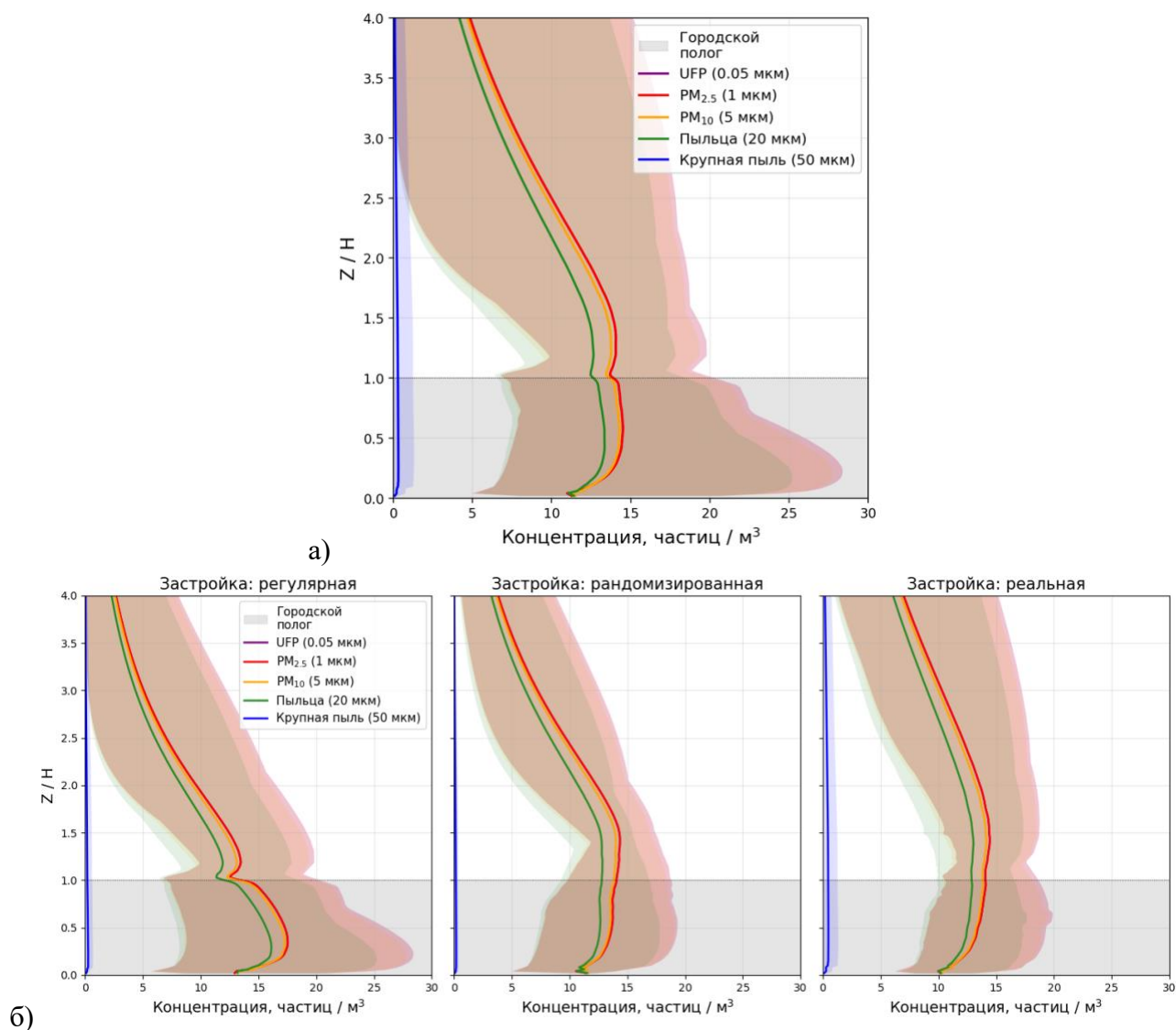


Рисунок 3.24. Вертикальные профили средней концентрации разных типов частиц для уличного источника при нейтральной стратификации: в среднем по всем конфигурациям застройки (а), в среднем по конфигурациям определённого типа застройки (б). Осреднение концентраций производилось по дальней от источника половине области (координаты $[200, 400]$ м по X).

Чтобы количественно проверить, сохраняются ли выявленные в прошлом разделе регрессионные зависимости при смене типа частиц, модели М1, М2а, М2б и М3 были подогнаны и проверены для каждой фракции на полной выборке из 48 конфигураций. В таблице 3.7 приведены значения R_{adj}^2 для приповерхностной концентрации $\bar{C}_{0-4м}$.

Для трёх «лёгких» фракций (UFP, $PM_{2.5}$, PM_{10} – диаметр менее 10 мкм) значения R_{adj}^2 во всех четырёх моделях совпадают с точностью до округления и, следовательно, воспроизводят результаты, полученные ранее для $PM_{2.5}$: базовая модель М1 (только ЛКЗ) даёт $R_{adj}^2 \approx 0.19$, а

добавление морфометрического композита в М3 поднимает её до 0.71. Для пылицы (22 мкм) метрики качества всех моделей лишь незначительно ниже (М3: 0.70 против 0.71 у PM_{2.5}), что согласуется с её промежуточным положением с точки зрения важности турбулентного переноса и гравитационного оседания. Существенное отличие наблюдается только для крупной пыли (50 мкм): базовое качество М1 заметно выше ($R_{adj}^2 \approx 0.47$ против 0.19 у мелких фракций), однако добавление морфометрических предикторов в М2а, М2б или М3 не даёт значительного прироста качества. Физически это объясняется тем, что для крупной пыли быстрое гравитационное оседание становится доминирующим процессом: концентрация резко падает уже на коротком расстоянии от источника и в значительной мере определяется самим фактом близости/удалённости от источника, а не геометрией обтекания зданий. Связь приповерхностной концентрации с внутренней структурой застройки при этом ослабевает, и дополнительные морфометрические предикторы теряют информативность.

Таблица 3.7. Аналогично таблице 3.5, но для разных типов частиц, только для уличного источника и только для концентрации в слое 0-4 м $\bar{C}_{0-4м}$ по полной выборке конфигураций застройки.

Тип частиц	Модель				Разница М3 – М1
	М1	М2а	М2б	М3	
UFP, PM _{2.5} , PM ₁₀ (<10 мкм)	0.19	0.48	0.49	0.71	0.52
Пыльца (22 мкм)	0.19	0.48	0.48	0.7	0.51
Крупная пыль (50 мкм)	0.47	0.49	0.45	0.46	-0.01

Таким образом, выявленные закономерности о влиянии анизотропии и хаотичности застройки на пространственное распределение частиц, а также о применимости ЛКЗ в роли предиктора устойчиво воспроизводятся для всех рассмотренных аэрозольных фракций, в переносе которых гравитационное оседание играет незначительную роль, а доминирует турбулентная диффузия (UFP, PM_{2.5}, PM₁₀, частично пыльца). Для фракций с активным гравитационным оседанием (крупная минеральная пыль) применимость предложенного подхода остаётся под вопросом и требует более детальных исследований.

3.6 Выводы по главе 3

В настоящей главе проведено системное исследование влияния морфологии городской застройки на пространственное распределение аэрозолей с использованием вихреразрешающей модели НИВЦ МГУ и ИВМ РАН со встроенным лагранжевым модулем

переноса частиц. На основе 48 конфигураций застройки (4 типа ЛКЗ \times 12 вариантов: регулярные, рандомизированные и реальные московские) и серии расчётов в нейтральной и слабоустойчивой стратификации получены следующие основные результаты.

Во-первых, установлено качественное изменение доминирующих факторов переноса аэрозолей в зависимости от структурной упорядоченности и анизотропии застройки. В регулярных конфигурациях с высокой анизотропией A_f пространственное распределение концентрации критически зависит от ориентации каньонов относительно ветра – внутриклассовая изменчивость между конфигурациями одного типа ЛКЗ превышает или сопоставима с межклассовой (между разными ЛКЗ). В рандомизированной и реальной застройке с высокой хаотичностью (энтропией S_H) и низкой анизотропией A_f множество пространственных масштабов и более случайное расположение зданий сглаживает направленные эффекты, и ключевыми становятся изотропные интегральные характеристики района, формализованные типом ЛКЗ, особенно в случае переноса фоновое аэрозольного загрязнения, изначально равномерно перемешанного по высоте.

Во-вторых, количественно показано, что классификация ЛКЗ является информативным предиктором характеристик аэрозольного загрязнения. Базовая модель линейной регрессии М1 на основе только типа ЛКЗ объясняет значительную долю дисперсии $\bar{C}_{0-4м}$, \bar{C}_H/\bar{C}_{4H} и показателя k для рандомизированных и реальных конфигураций при фоновом источнике (R_{adj}^2 от 0.61 до 0.99, в среднем 0.90), но теряет качество для регулярной застройки и для приповерхностного уличного источника. Добавление одного направленно-ориентированного морфометрического предиктора (λ_f , $\tilde{\lambda}_f - 1$ или композита $(\tilde{\lambda}_f - 1) \cdot A_f/S_H$) поднимает R_{adj}^2 с отрицательных значений до 0.78-0.97 в проблемных подвыборках и улучшает качество для полной выборки (преимущество по R_{adj}^2 над М1 от +0.08 до +0.52). Эти закономерности сохраняются для рассмотренных частиц, представляющих аэрозольные фракции UFP, PM_{2.5}, PM₁₀ и пыльцу; для крупной пыли область применимости подхода сужается из-за доминирования гравитационного оседания. Также закономерности в общем виде устойчивы к смене термического режима от нейтральной стратификации к слабоустойчивой, однако качество описательной способности ЛКЗ и выбор оптимальных дополнительных параметров могут варьироваться.

Полученные результаты позволяют сформулировать следующие защищаемые положения:

1) Пространственное распределение аэрозолей в городской застройке зависит от её морфометрических параметров: в регулярной застройке с выраженной ориентацией каньонов (высокой анизотропией) решающую роль играют характеристики, зависящие от направления ветра, а в нерегулярной – изотропные интегральные показатели, не связанные с направлением воздушного потока.

2) Тип локальной климатической зоны служит важным предиктором пространственного распределения аэрозолей в городском пограничном слое и наиболее информативен в случае фонового (удалённого) источника частиц.

Глава 4. Моделирование процессов осаждения частиц

В данной главе исследуется роль одного из важных физических процессов, определяющих время жизни аэрозолей в городской среде – сухого осаждения на вертикальные поверхности зданий. На основе серии численных экспериментов проводится оценка чувствительности полей концентрации частиц-представителей фракции $PM_{2.5}$ к параметрам их взаимодействия со стенами, а также анализируется бюджет осаждения на такие поверхности. Кроме того, проводится сопоставление модельных результатов с уникальными данными натурных измерений осаждения частиц в городском каньоне г. Москвы.

4.1 Исследование чувствительности концентраций аэрозолей к вероятности осаждения на вертикальные поверхности

Для оценки влияния осаждения частиц на стены зданий была проведена комплексная серия численных экспериментов, разделенная на два этапа. За исключением типов частиц, все остальные параметры экспериментов соответствовали тем, что описаны в Главе 3.

На первом этапе, целью которого было сравнение эффекта осаждения в различных типах городской застройки (ЛКЗ 4, 5 и 6), рассматривались 4 базовых сценария для частиц $PM_{2.5}$. В этих экспериментах вероятность осаждения на горизонтальные поверхности (земля, крыши) была зафиксирована на уровне $P_h = 90\%$ (для изолированной оценки роли именно вертикальных поверхностей), а вероятность осаждения на вертикальные стены (P_v) варьировалась:

- $P_v = 0\%$ – контрольный сценарий: осаждения на стенах нет, происходит только упругий отскок.
- $P_v = 10\%$ – низкая вероятность осаждения на стенах (гладкие поверхности).
- $P_v = 50\%$ – средняя вероятность осаждения на стенах.
- $P_v = 100\%$ – при столкновении всегда происходит осаждение, упругий отскок невозможен (например, пористые или влажные поверхности).

На втором этапе, дополнительном, для более глубокого анализа чувствительности концентраций к осаждению и построения детальных зависимостей была использована более узкая выборка конфигураций – только высокая застройка ЛКЗ 4, наиболее распространённая в условиях Москвы. В рамках этого этапа было смоделировано 36 типов частиц, представляющих собой все возможные комбинации вероятностей осаждения на горизонтальные (P_h) и вертикальные (P_v) поверхности из набора значений: 0%, 10%, 20%, 40%, 60% и 100%. Такой плотный перебор параметров позволил построить детальные карты отклика

концентрации и бюджета осаждения, а также изолированно оценить вклад каждого типа поверхностей.

На рисунке 4.1а, где показаны поля средней приповерхностной концентрации при нейтральной стратификации, наглядно виден механизм осаждения и его влияние на концентрации на «пешеходном уровне» (в слое 0-4 м): с ростом вероятности P_v происходит интенсивное очищение воздуха на подветренных сторонах зданий. Если при $P_v = 0\%$ шлейф примеси свободно огибает препятствия, формируя зоны застоя с высокой концентрацией в ближайших подветренных каньонах, то при $P_v = 100\%$ стены зданий выступают в роли эффективного фильтра, удаляющего значительную часть проходящих мимо и сталкивающихся с ними частиц. Этот эффект особенно заметен на удалении от источника, где частицы успевают многократно провзаимодействовать с поверхностями, и внутри перпендикулярных ветру каньонов, где нет выраженного ветрового «канала» вдоль улицы и важнее роль турбулентного переноса, позволяющего частицам активнее сталкиваться со зданиями.

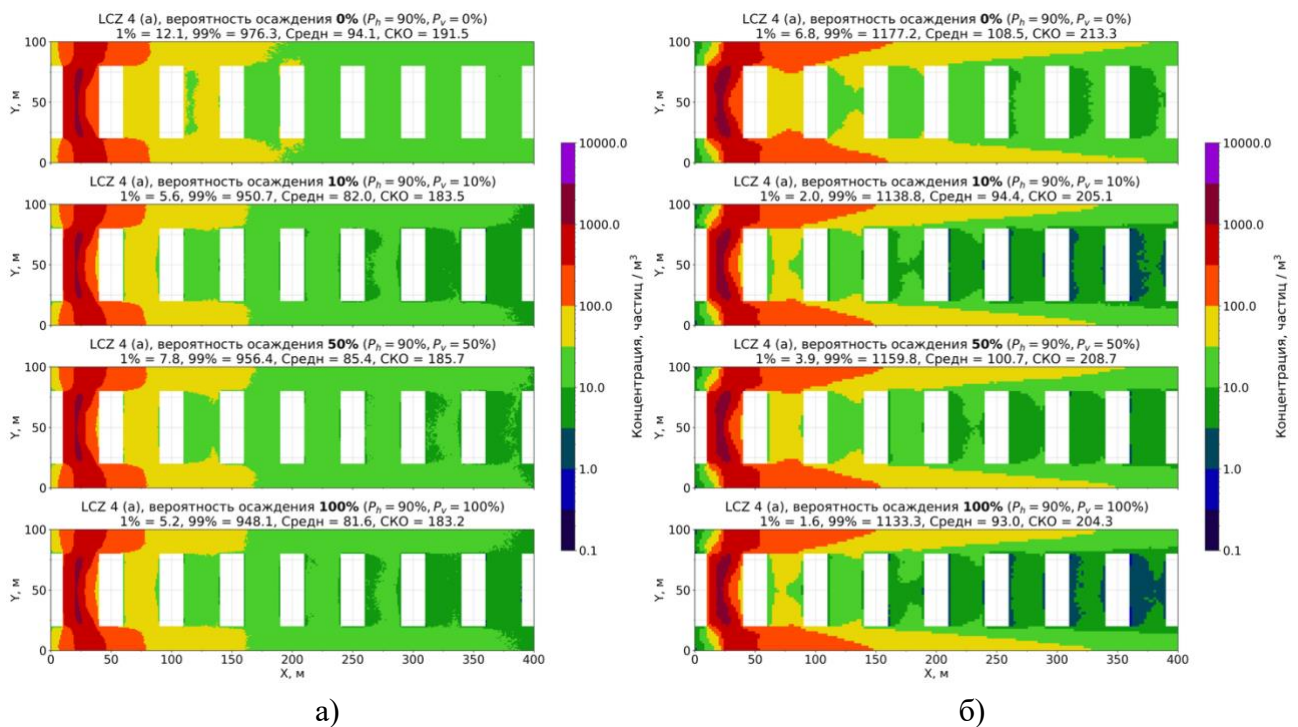


Рисунок 4.1. Поля средней концентрации частиц $PM_{2.5}$ с разной вероятностью осаждения на стенах в слое 0-4 м для конфигурации “ЛКЗ 4 (а)”, в среднем по периодическим блокам вдоль оси Y . Нейтральная (а) и слабоустойчивая (б) стратификация.

При переходе к слабоустойчивой стратификации (рис. 4.1б) эффект очищения сохраняется и даже усиливается в абсолютных значениях. Однако из-за подавленного турбулентного перемешивания воздействие осаждения становится более

дифференцированным в пространстве: концентрации сильнее падают в подветренных дворах (поперечных каньонах), где циркуляция более замкнута, но меньше меняются в продольных «каналах» (улицах), где частицы проносятся «транзитом» с минимальным контактом со стенами. Как и в прошлой главе, при переходе от нейтральной к слабоустойчивой стратификации анализируются качественные закономерности и эффекты – из-за различий в разрешении расчётной сетки абсолютные концентрации напрямую не сравниваются между двумя метеорологическими постановками.

Для наглядной оценки пространственной структуры стоков частиц на рисунке 4.2 представлена трёхмерная визуализация плотности осаждения частиц на поверхностях зданий и земли для регулярной конфигурации ЛКЗ 4 «а» с вероятностями осаждения $P_h = 90\%$, $P_v = 50\%$. Визуализация для нейтральной стратификации (рис. 4.2а и 4.2б) подтверждает, что в условиях высокой застройки стены, обладающие наибольшей суммарной площадью (около 51% от площади всех поверхностей в данной конфигурации), выступают в роли значительного стока для осаждения. Плотность осаждения крайне неоднородна: максимумы наблюдаются на краях наветренных фасадов, принимающих на себя основное воздействие шлейфа, а также на боковых гранях зданий в зонах отрыва потока. В то же время крыши демонстрируют наименьшую плотность осаждения, принимая на себя лишь малую часть частиц.

В условиях слабоустойчивой стратификации (рис. 4.2в и 4.2г) паттерны осаждения в целом сохраняются, однако происходит перераспределение интенсивности. Зоны максимального осаждения локализуются вдоль сонаправленных ветру улиц на земле и боковых стенах зданий из-за концентрации шлейфа внутри уличных ветровых «каналов», а роль осаждения в подветренных каньонах (перпендикулярных ветру) ослабевает. Возрастает и роль наветренных рёбер зданий в осаждении из-за столкновения с потоком и образования механической турбулентности. В целом плотность осаждения падает медленнее при удалении от источника, так как при ослабленном перемешивании частицам сложнее покинуть городской полог.

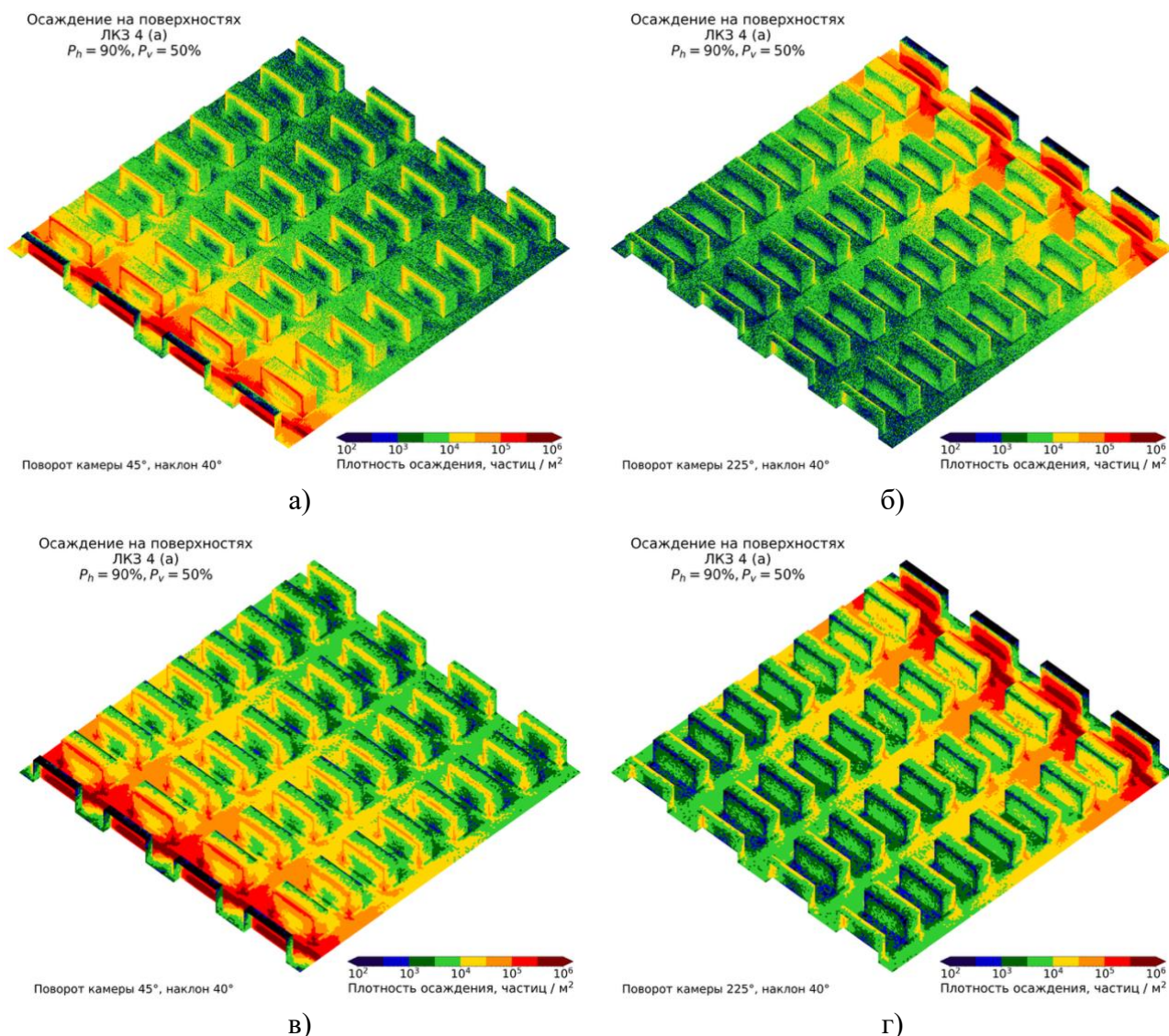


Рисунок 4.2. Трёхмерная визуализация суммарного количества осевших частиц (плотности осаждения) при нейтральной (а, б) и слабоустойчивой (в, г) стратификации для ЛКЗ 4 «а». Поворот камеры 45° (а, в) и 225° (б, г).

Аналогичные визуализации демонстрируются на рисунке 4.3 для нейтральной стратификации и реальной застройки: многоэтажной ЛКЗ 4 «г1» (рис. 4.3а и 4.3б, современный жилой комплекс «Люблинский парк» в районе Люблино, Москва) и плотной среднеэтажной ЛКЗ 2 «г5» (рис. 4.3в и 4.3г, смесь исторической и современной застройки в районе Хамовники, Москва).

В более регулярной ЛКЗ 4 «г1» общие закономерности пространственного распределения осевших частиц аналогичны ранее описанным для регулярной конфигурации ЛКЗ 4 «а». Различия преимущественно проявляются в асимметрии картины осаждения на разных частях зданий из-за более сложной структуры течения. На фоне большей высоты и длины зданий ещё

более заметным становится, что минимум осадения для наветренной стороны находится в центральной части стены здания, однако при смене направления на противоположное (для подветренной стороны) из-за рециркуляционных вихрей картина меняется на противоположную – и самыми чистыми оказываются части стены ближе к рёбрам здания. В среднем по наветренным и подветренным стенам самой «чистой» частью фасада остаётся зона стены в верхней половине на удалении от рёбер здания.

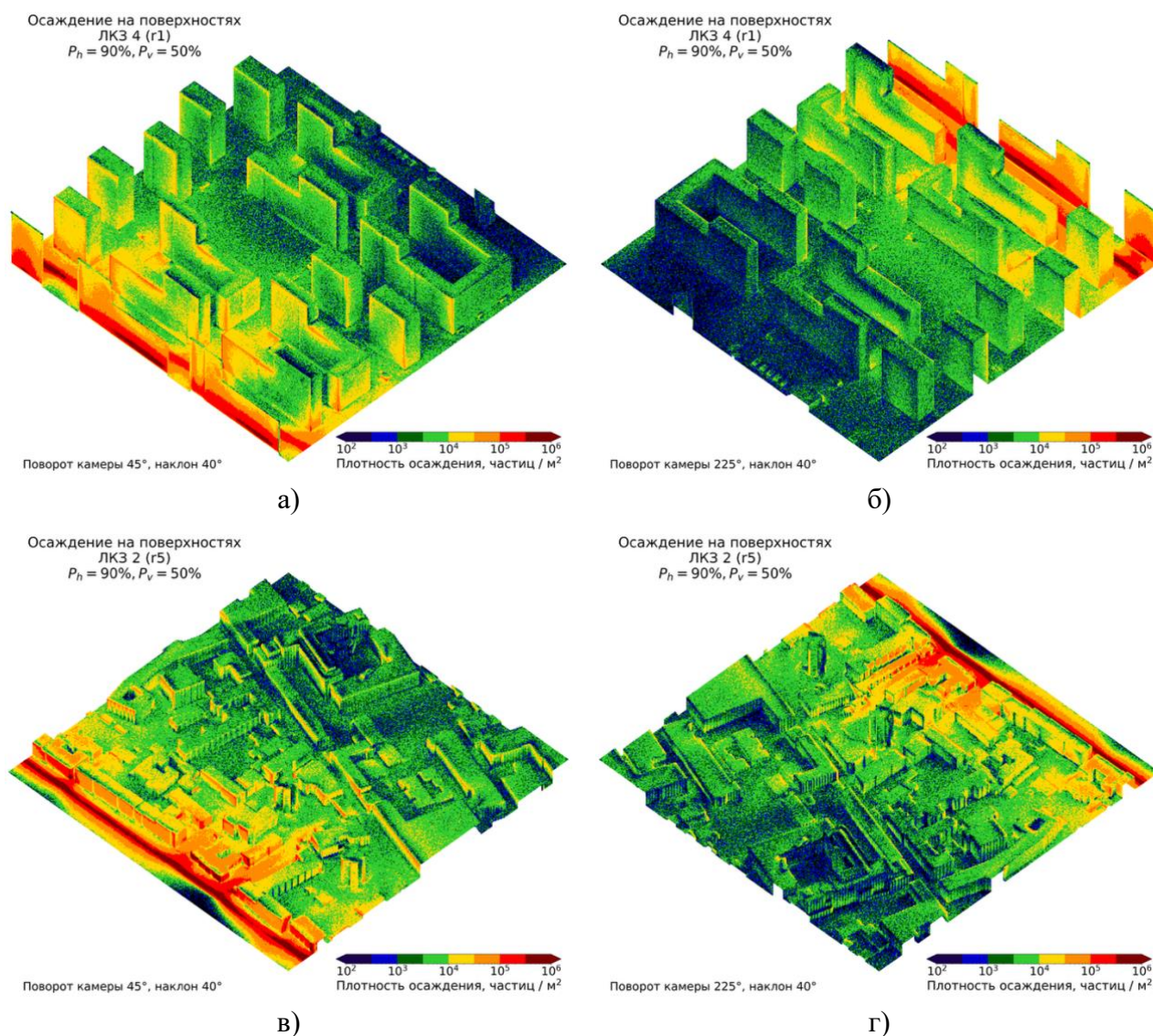


Рисунок 4.3. Трёхмерная визуализация суммарного количества осевших частиц (плотности осадения) при нейтральной стратификации для реальной московской застройки: ЛКЗ 4 «r1» (а, б) и ЛКЗ 2 «r5» (в, г). Поворот камеры 45° (а, в) и 225° (б, г).

В более хаотичной ЛКЗ 2 «r5» очень сильно проявляется влияние улиц на распределение осадения. Фасады зданий, вытянутых вдоль источника на Садовом кольце (перпендикулярно ветру), принимают на себя значительную часть осадения – и в их ветровой тени значительное

осаждение встречается только на наветренных рёбрах крыш. В то же время на малочисленных и узких параллельных ветру улицах рядом с источником концентрируется большое число частиц, что приводит к активному осаждению на зданиях вдоль этих улиц и смежных дворах. В том числе наблюдаются ситуации, когда двор закрыт от источника (Садового кольца) вытянутым зданием, но высокие концентрации частиц проникают со стороны отходящей от источника улицы, что может приводить к ухудшенному качеству воздуха и активному загрязнению окон и фасадов из-за осаждения.

Вертикальные профили концентрации для ЛКЗ 4 (рис. 4.4) показывают, что увеличение вероятности осаждения приводит к монотонному снижению концентрации на всех высотах и при обоих вариантах стратификации. При этом важно отметить, что общая форма профиля тоже меняется, хоть и слабо. Происходит выравнивание профиля внутри городского полога. Это свидетельствует о том, что осаждение действует и как интегральный сток массы, уменьшая общее количество частиц в объеме, и как фактор изменения структуры вертикального содержания аэрозолей в городском приземном слое.

В случае нейтральной стратификации (рис. 4.4а) наибольший эффект от фасадного осаждения наблюдается для регулярной и рандомизированной застройки (снижение концентрации внутри полога на 30-40%), в реальной застройке он меньше (снижение на 20-30%) из-за активного выноса частиц в слой над пологом и более чёткого разделения на уличные и дворные пространства – оставшиеся внутри полога частицы концентрируются вдоль сонаправленных ветру улиц, взаимодействуя с малой долей зданий. Для слабоустойчивой стратификации (рис. 4.4б) картина качественно сохраняется, но усиливается количественный эффект от фасадного осаждения (снижение концентраций на 40-50%).

Для более детального анализа вклада различных поверхностей в осаждение на рисунке 4.5 показаны средние профили по реальным конфигурациям ЛКЗ 4, где варьируются вероятности осаждения P_h (горизонтальные пов-ти) и P_v (вертикальные пов-ти). Сравнение сценариев «только стены» ($P_h = 0\%$, $P_v = 100\%$, зелёная линия) и «только горизонтальные поверхности» ($P_h = 100\%$, $P_v = 0\%$, золотая линия) демонстрирует (рис. 4.5), что осаждение на вертикальные стены в реальной застройке оказывает влияние на снижение концентраций, сравнимое с эффектом от осаждения на землю и крыши – в обоих случаях внутри городского полога концентрации снижаются на 25-40%.

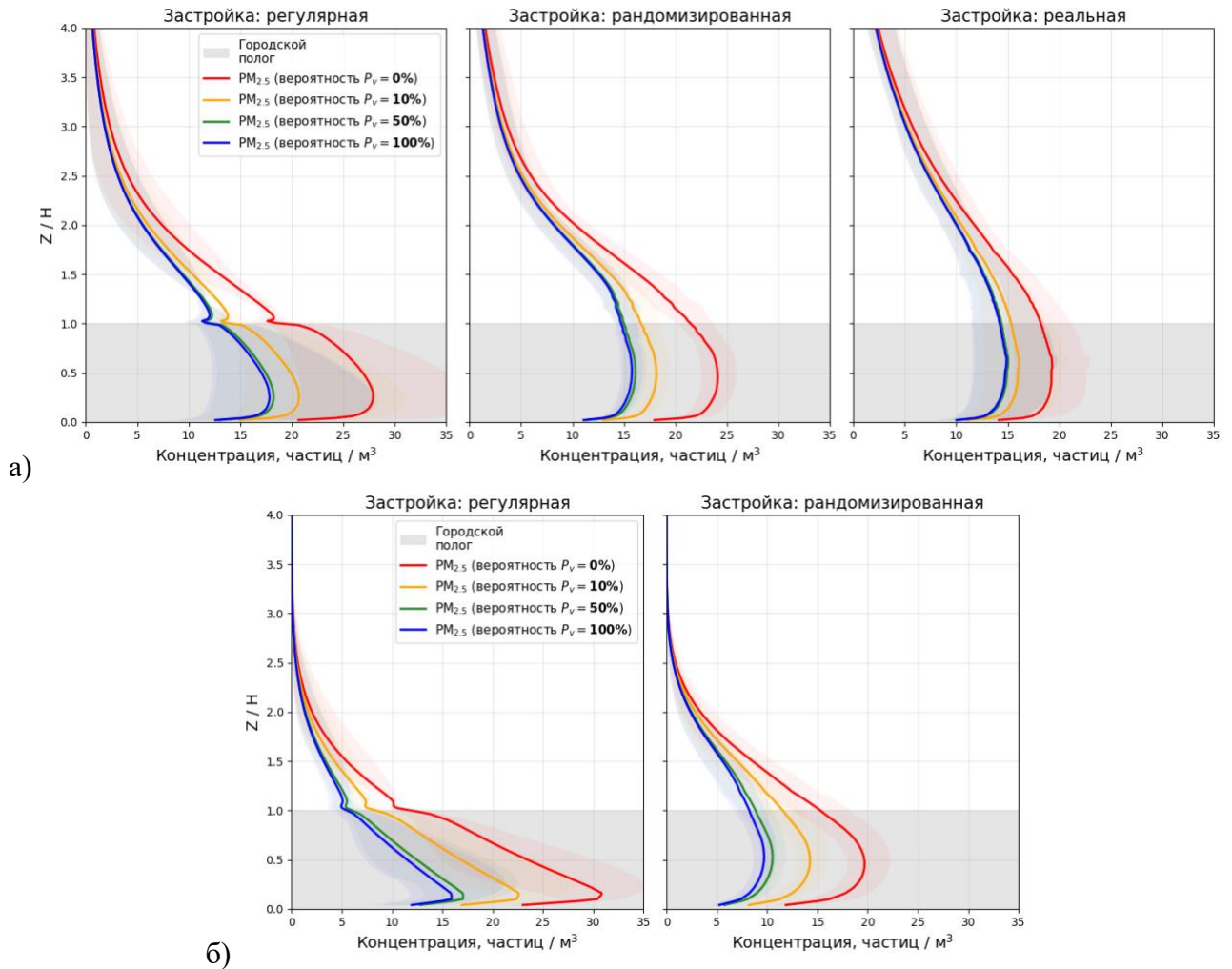
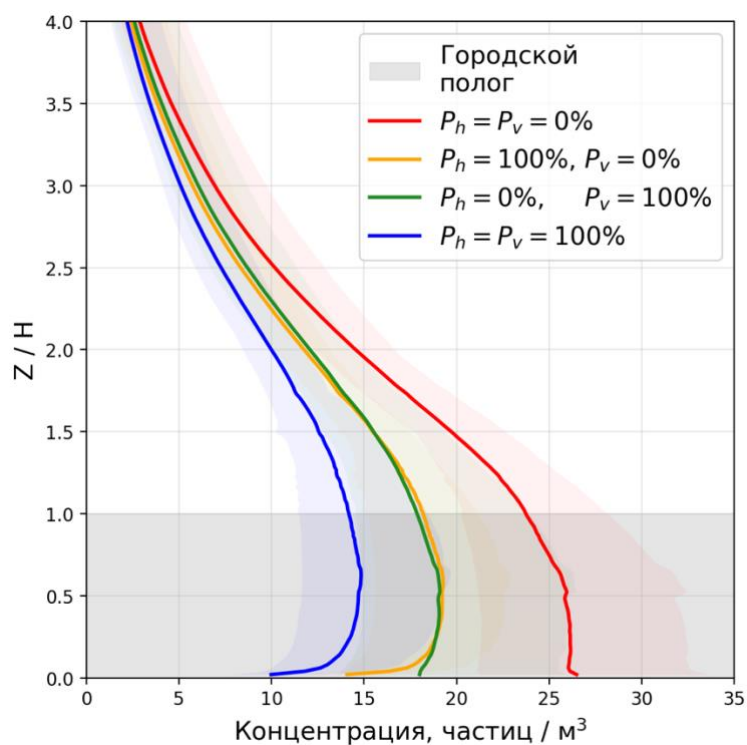


Рисунок 4.4. Вертикальные профили средней концентрации частиц $PM_{2.5}$ с разной вероятностью осаднения на стенах P_v и фиксированной $P_h = 90\%$ для конфигураций ЛКЗ 4 в среднем по разным типам застройки при нейтральной (а) и слабоустойчивой (б) стратификации. Осреднение концентраций производилось по дальней от источника половине области (координаты [200, 400] м по X).

Заметна разница в форме профиля (рис. 4.5): больший эффект от стен проявляется в верхней половине городского полога, а у поверхности земли, наоборот, ключевое влияние оказывает осаднение на горизонтальные плоскости, что согласуется с общим распределением площади поверхностей по высоте внутри полога. Также заметно, что в случае максимальных вероятностей ($P_h = P_v = 100\%$) для всех поверхностей концентрации значительно снижаются (на 20-30%) относительно сценария «только горизонтальные поверхности» (синяя линия относительно золотой линии), что подчёркивает потенциальную важность учёта фасадного осаднения в моделях, где сухое осаднение уже учитывается, но только для горизонтальных поверхностей.



а)

Рисунок 4.5. Вертикальные профили средней концентрации $PM_{2.5}$ в ЛКЗ 4 (реальные московские конфигурации) при раздельном варьировании P_h и P_v для нейтральной стратификации. Осреднение концентраций производилось по дальней от источника половине области (координаты [200, 400] м по X).

Влияние вероятности осаждения, массы и размера частиц на дальность распространения загрязнения (скорость затухания шлейфа концентрации) в реальной московской застройке ЛКЗ 4 проанализировано с помощью горизонтальных профилей концентрации (рис. 4.6). Каждый горизонтальный профиль (средний по выборке конфигураций) был сглажен скользящим средним и аппроксимирован степенной функцией (3.8). Визуализация сглаженной и аппроксимирующей кривых на рисунке 4.6 в качестве примера приведена только для референсного типа частиц – $PM_{2.5}$ без осаждения. Для остальных типов частиц приводятся только исходные средние профили и диапазон значений по конфигурациям.

Физический смысл показателя степени k из аппроксимирующей функции удобно пояснить на референсном сценарии без осаждения ($P_h = P_v = 0\%$, серая кривая на рис. 4.6а и 4.6б), в котором затухание концентрации определяется исключительно городской аэродинамикой. В этом случае профиль описывается степенным законом с показателем $k \approx -0.93$, то есть затухает медленнее теоретического значения $k = -1$, ожидаемого для поперечного ветру линейного источника в турбулентном пограничном слое над однородной открытой поверхностью [Batchelor, 1965], где линейное вертикальное расширение шлейфа в

сочетании с законом сохранения массы даёт обратно пропорциональную связь концентрации с расстоянием. Это отклонение указывает на то, что городской полог действует как полупроницаемый барьер: режим скользящего течения (skimming flow) и рециркуляционные вихри ограничивают вертикальный вынос примеси из полога по сравнению с открытой местностью, удерживая её у поверхности и поддерживая повышенные концентрации на удалении от источника. Включение осаждения на вертикальные поверхности ($P_v > 0$) добавляет распределённый по всей высоте полога сток, который увеличивает скорость затухания ($|k|$ приближается к 1) сверх базового аэродинамического тренда и укорачивает шлейф загрязнения.

С увеличением P_v (рис. 4.6а) скорость затухания концентрации с расстоянием от источника заметно возрастает – шлейф примеси становится короче, а дальние районы застройки оказываются более чистыми. При вариации массы и размера частиц (следовательно, и скорости гравитационного оседания) колоссальные различия видны (рис. 4.6б) между группой частиц, представляющих фракции от UFP до пылицы (от 0.05 до 22 мкм), и тяжёлой минеральной пылью (50 мкм) – скорость падения концентрации отличается почти в 2 раза, падение концентрации на два порядка относительно значений рядом с источником наблюдается уже в пределах 25 м от источника для крупной пыли и на расстоянии порядка 350-400 м для более лёгких рассмотренных частиц. При этом разница внутри группы более лёгких частиц минимальна как по значениям концентраций, так и по скорости затухания шлейфа.

Эти результаты для нейтральной стратификации демонстрируют важный факт: для рассмотренных частиц диаметром до 22 мкм (включая UFP, PM_{2.5}, PM₁₀ и пыlicу) разброс концентраций и скорости их пространственного затухания, вызванный неопределенностью описания осаждения на стены (рис. 4.6а), значительно превышает разброс, вызванный различием в размере и массе частиц (рис. 4.6б) [Varentsov et al., 2026]. Включение механизма осаждения на стены ($P_v > 0$) приводит к резкому увеличению скорости спада концентрации с расстоянием от источника, тогда как изменение размера и массы частиц в указанном диапазоне практически не влияет на форму профиля.

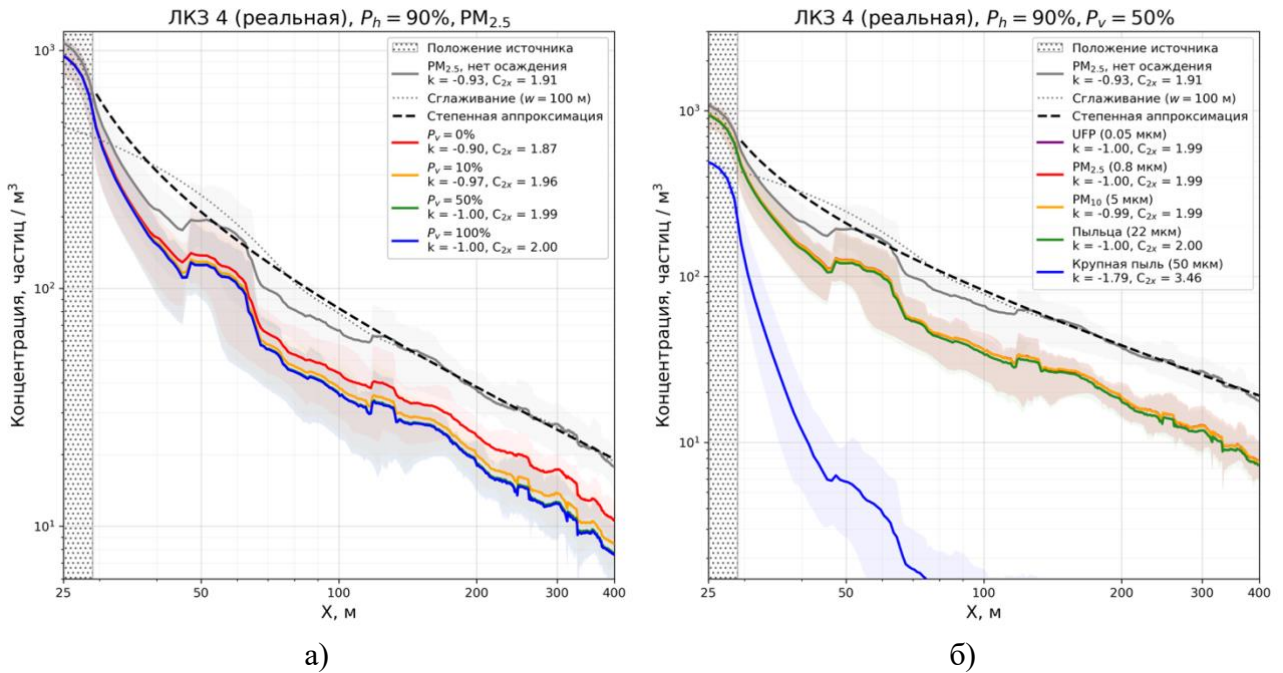


Рисунок 4.6. Горизонтальные профили средней приповерхностной (0-4 м) концентрации для реальных московских конфигураций ЛКЗ 4 при нейтральной стратификации. Частицы $PM_{2.5}$ с разной P_v и фиксированной $P_h = 90\%$ – сравнение эффектов от осаджения на стены (а), и частицы разных размеров и масс с фиксированными $P_v = 50\%$ и $P_h = 90\%$ – сравнение эффектов от гравитационного оседания частиц (б). Профиль $PM_{2.5}$ без осаджения (серая кривая, $P_h = P_v = 0\%$) приведён в роли референсного для сравнения масштаба отклонений.

Для рандомизированной застройки аналогичные сравнения были проведены для нейтральной (рис. 4.7а и 4.7б) и слабоустойчивой стратификации (рис. 4.7в и 4.7г). Для нейтральной стратификации сохраняются все закономерности, описанные ранее для реальной застройки (рис. 4.6). При слабоустойчивой стратификации скорость падения концентраций с расстоянием от источника возрастает из-за более слабого ветра и турбулентного переноса внутри городского полога. Заметно отличие от нейтральной стратификации в поведении пыли: вблизи источника концентрации падают заметно быстрее, чем у более лёгких частиц, что может быть связано с усилением роли гравитационного оседания при подавленной турбулентности. При этом наклон профиля пыли на масштабе всей области (показатель k) незначительно отличается от более лёгких частиц – это может быть связано с локальными аэродинамическими эффектами рядом с источником, при которых роль гравитационного оседания была особенно высокой – больше, чем в среднем по области. Тем не менее, для частиц-представителей фракций PM_{10} (рассмотренные диаметры до 5 мкм) и меньше вывод о

доминировании вариации параметров взаимодействия со стенами над вариацией гравитационного оседания остаётся в силе.

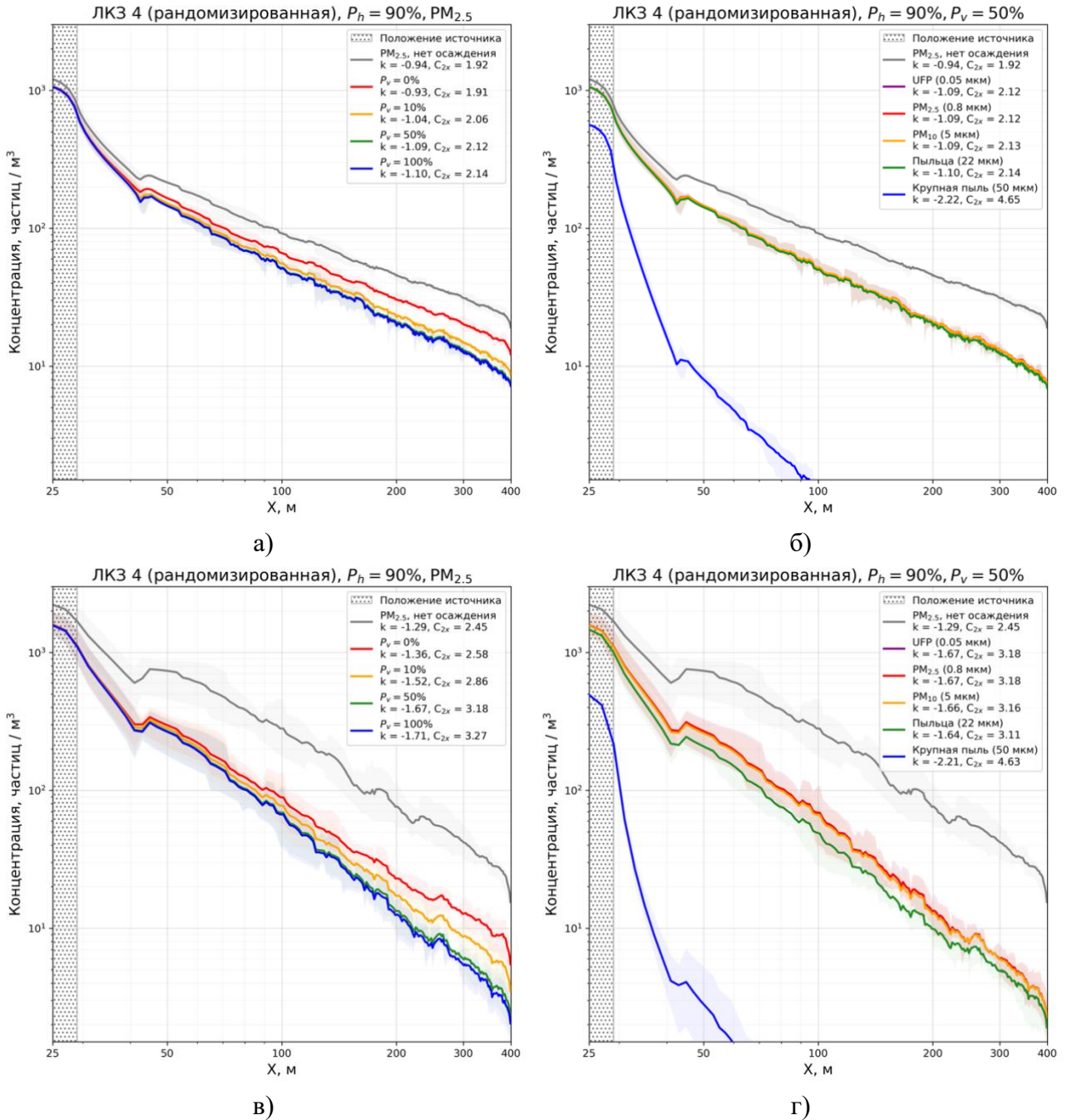


Рисунок 4.7. Горизонтальные профили средней приповерхностной (0-4 м) концентрации для рандомизированных конфигураций ЛКЗ 4 при нейтральной (а, б) и слабоустойчивой (в, г) стратификации. Для частиц $PM_{2.5}$ с разной P_v и фиксированной $P_h = 90\%$ (а, в) и частиц разных размеров и масс с фиксированными $P_v = 50\%$ и $P_h = 90\%$ (б, г).

Интегральная оценка влияния оседания на концентрации представлена на рисунке 4.8. Зависимость приповерхностной концентрации (на «пешеходном» уровне) от вероятности

осаждения на стены носит нелинейный, близкий к экспоненциальному характер. Наиболее резкое падение концентрации (на 25-30%) происходит уже при введении небольшой вероятности осаждения частиц на стенах ($P_v = 10\%$). Увеличение P_v до 100% снижает концентрацию в среднем в полтора раза (на 30-35%) при нейтральной стратификации и в два раза (на 45-50%) при слабоустойчивой.

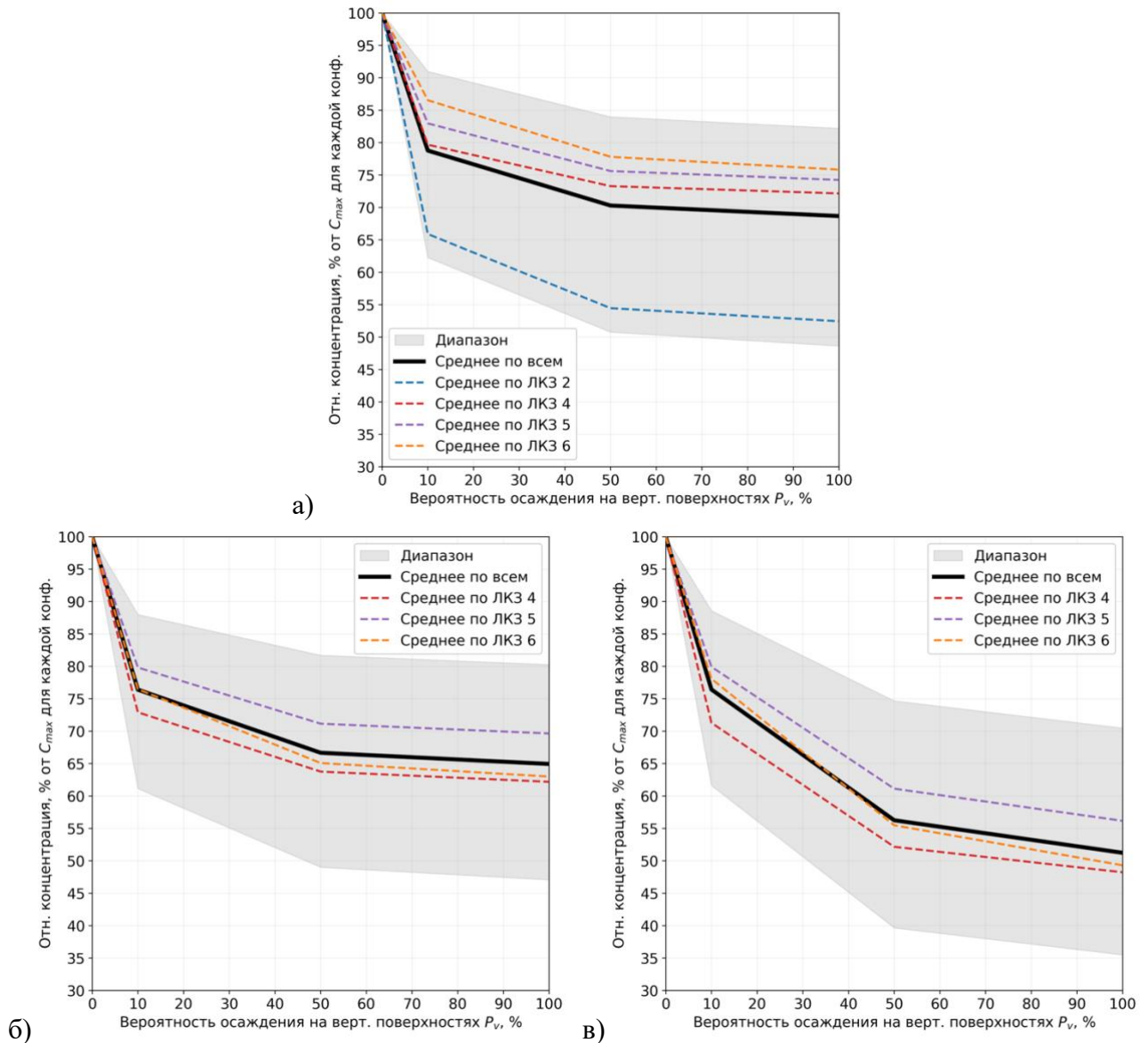


Рисунок 4.8. Зависимость средней приповерхностной (0-4 м) концентрации на удалении от источника (дальняя половина области) от вероятности осаждения частиц на стенах в среднем по всем конфигурациям и для разных типов ЛКЗ. Для реальной застройки при нейтральной стратификации (а), для рандомизированной застройки при нейтральной (б) и слабоустойчивой (в) стратификации.

На реальной московской застройке (рис. 4.8а) подтверждается ожидаемая закономерность – влияние фасадного осаждения на концентрацию в среднем растёт вместе с увеличением суммарной площади стен и плотности застройки: от ЛКЗ 6 (в среднем снижение на 24% при $P_v = 100\%$) к ЛКЗ 4 (на 28%) и далее резко к ЛКЗ 2 (на 48%).

Наконец, на рисунке 4.9 представлен анализ вклада вертикальных поверхностей (стен) в общий бюджет осаждения (доля частиц, осевших на стены, от общего числа осевших частиц). Рисунок демонстрирует, что в широком диапазоне значений ($P_v > 10\sim 20\%$) стены обеспечивают более 50% всего осаждения для рандомизированной застройки ЛКЗ 4. Область, где доминируют горизонтальные поверхности (красный цвет), ограничена лишь сценариями с крайне низкой вероятностью осаждения на стены. При переходе к устойчивой стратификации (рис. 4.9б) область доминирования роли стен сохраняется и даже чуть расширяется, охватывая практически всё фазовое пространство параметров. Это количественно доказывает, что в высокой городской застройке стены зданий могут быть главным «очистителем» воздуха при широком спектре сценариев взаимодействия частиц с материалами фасадов.

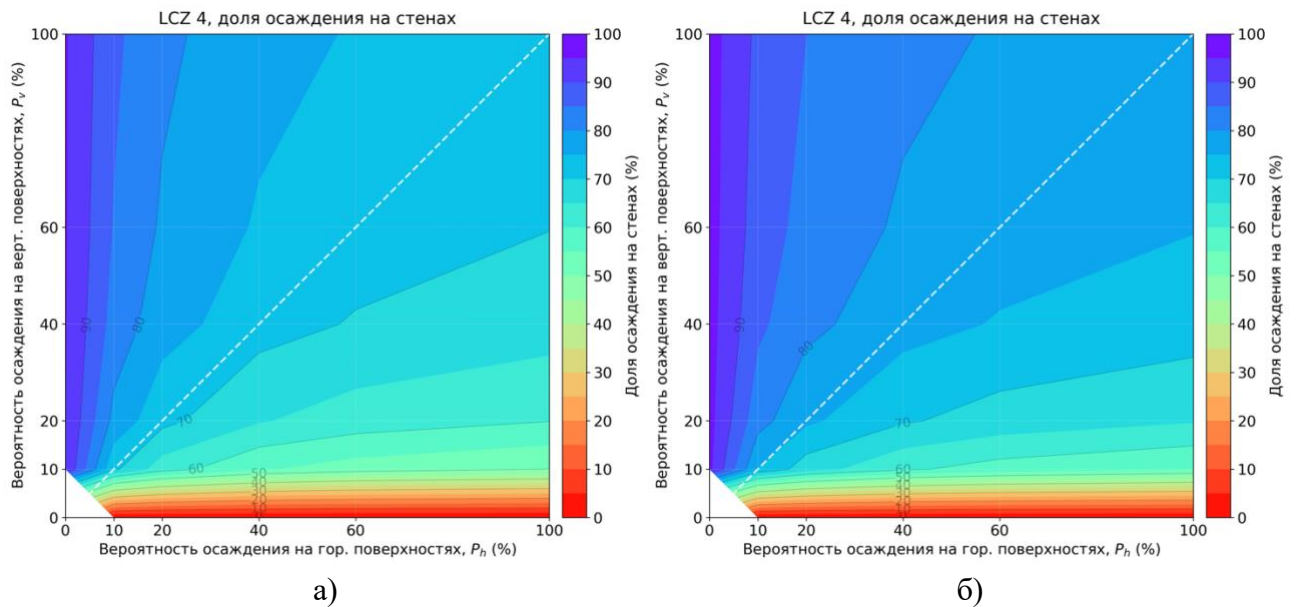


Рисунок 4.9. Вклад стен в суммарное осаждение частиц при нейтральной (а) и слабоустойчивой (б) стратификации для рандомизированных конфигураций ЛКЗ 4.

Для анализа влияния морфологии застройки на структуру осаждения на рисунке 4.10 представлены осреднённые данные для различных типов ЛКЗ (реальные московские конфигурации) при нейтральной стратификации. Левый рисунок (рис. 4.10а) показывает вклад различных поверхностей в суммарное осаждение. Видно, что уже при малых вероятностях фасадного осаждения ($P_v \geq 10\%$) в среднеэтажных и многоэтажных типах застройки (ЛКЗ 2, 4, 5) доминирующая роль принадлежит вертикальным стенам, а их доля слегка варьируется: в

самой высокой застройке (ЛКЗ 4) стены обеспечивают до 70-75% всего осаждения благодаря большой площади поверхности и активному перемешиванию внутри полого, тогда как в среднеэтажной застройке (ЛКЗ 2 и 5) их вклад составляет до 60-70%. Характерной особенностью плотной застройки (ЛКЗ 2) является практически равный вклад крыши и земли, что объясняется сравнимыми суммарными площадями (56% и 44% площади горизонтальных поверхностей у земли и крыш соответственно) и активным выносом частиц в слой над пологом.

Правый рисунок (рис. 4.10б) демонстрирует плотность осаждения (накопленное количество частиц на единицу площади поверхности). Примечателен результат для ЛКЗ 6: в этом типе ЛКЗ плотность осаждения достигает максимума для всех поверхностей при любом P_v относительно других ЛКЗ. Это объясняется наименьшей суммарной площадью поверхностей и демонстрирует, что в городской застройке суммарный поток сухого осаждения не описывается линейной зависимостью от площади всех поверхностей, а имеет более сложную связь с геометрией.

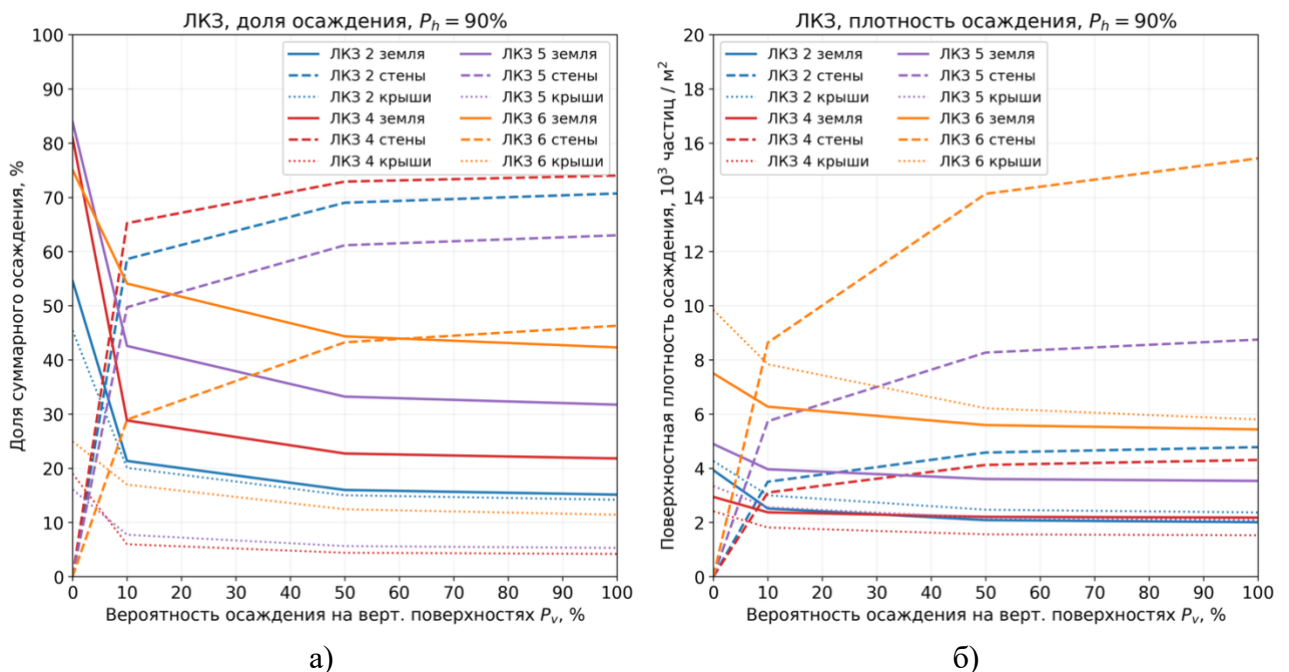


Рисунок 4.10. Вклад различных поверхностей в суммарное осаждение (а) и поверхностная плотность осаждения (б) для разных типов ЛКЗ при нейтральной стратификации.

4.2 Моделирование осаждения частиц в городском каньоне г.Москвы: исследование на примере ЖК «Люблинский парк»

Для демонстрации применимости разработанного инструментария к решению практических задач и для детального исследования процессов осаждения в условиях реальной, неидеализированной городской застройки был проведен численный эксперимент на примере

жилого комплекса в Москве. Этот сценарий позволяет не только оценить способность модели воспроизводить физические процессы в сложной геометрии, но и сопоставить полученные результаты с уникальными данными натуральных наблюдений.

В качестве объекта исследования был выбран жилой комплекс «Люблинский парк», расположенный в Юго-Восточном административном округе Москвы. Данный ЖК представляет собой характерный пример современной плотной многоэтажной застройки, формирующей выраженные уличные каньоны, и является репрезентативным объектом для изучения качества воздуха в новых жилых районах мегаполиса.

Для данного объекта были доступны результаты полевых измерений пылевых выпадений, проведённых в 2023-2024 гг. (Кошелева, 2024). В ходе натурального эксперимента пробы пыли отбирались методом вертикальных планшетов, в качестве которых использовались стёкла окон на общедоступных балконах. Такой метод позволяет напрямую оценить количество частиц, удаляемых из атмосферы за счет осаждения на вертикальные поверхности зданий. Пробоотбор проводился на западной и восточной сторонах одного из уличных каньонов на пяти высотных уровнях: 2, 5, 9, 13 и 17-й этажи, что соответствует высотам примерно 6, 15, 24, 39 и 51 м от земли. По результатам лабораторного анализа были получены данные о массе осажённых частиц фракции PM_{10} на единицу площади за период экспозиции (табл. 4.1).

Таблица 4.1. Общее количество частиц PM_{10} в уличном каньоне ЖК «Люблинский парк», отложившихся на поверхности стекол-планшетов на разных этажах в разные сроки наблюдений [Кошелева, 2024].

Высота измерения	Западная сторона каньона, д.76, к.5, 1 и 2 подъезды				Восточная сторона каньона, д.76, к. 3 и 4			
	Осень 2023	Весна 2024	Осень 2024	Среднее	Осень 2023	Весна 2024	Осень 2024	Среднее
	Выпадения PM_{10} , г/м ²							
6 м	0.0120	0.0559	0.0588	0.0423	0.0048	0.0177	0.0318	0.0180
15 м	0.0219	0.0431	0.0539	0.0396	0.0104	0.0150	0.0430	0.0228
24 м	0.0240	0.0282	0.0792	0.0438	0.0160	0.0077	0.0427	0.0221
39 м	0.0153	0.0382	0.0721	0.0419	0.0067	0.0103	0.0239	0.0136
51 м	0.0343	0.0250	0.0722	0.0438	0.0045	0.0084	0.0294	0.0141

Эти данные показали интересную особенность: количество осевшей пыли слабо зависит от высоты, но имеет сильную асимметрию между стенами каньона, характер которой менялся от сезона к сезону.

Для моделирования переноса и осаждения частиц в районе ЖК «Люблинский парк» геометрия зданий и прилегающих территорий была воссоздана на основе данных проекта OpenStreetMap. Итоговая карта высот ЖК и окружающей территории представлена на рис. 4.11 с выделением положения источников для западного, юго-западного и южного ветров в качестве примеров. В случаях остальных направлений ветра источники задавались аналогично с соответствующей стороны расчётной области.

Расчеты проводились в области размером $800 \times 800 \times 320$ м с разрешением $4 \times 4 \times 4$ м. Поскольку распределение источников пыли в районе ЖК точно неизвестно (это могут быть как минимум автомагистраль, железная дорога Курского направления, стройплощадки и дальний перенос), в модели был задан «фоновый» сценарий: источник частиц располагался вдоль всей наветренной границы расчётной области с равномерным по высоте профилем эмиссии. Это имитирует поступление загрязненной воздушной массы в район застройки.

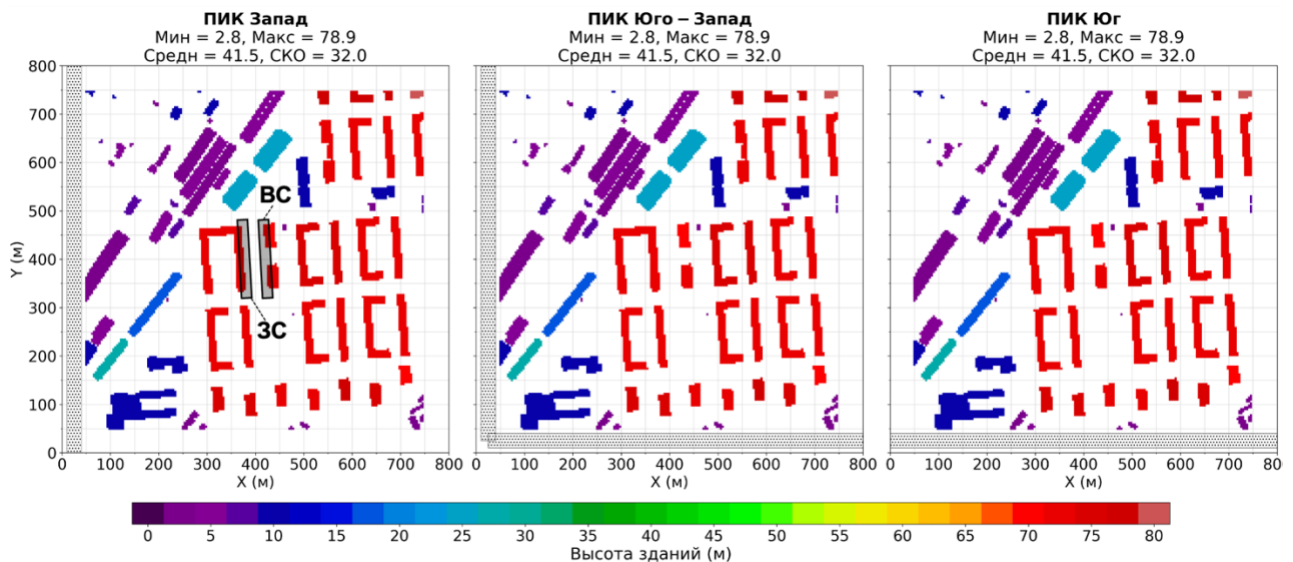


Рисунок 4.11. Карты высот для застройки в районе жилого комплекса «Люблинский парк». Штриховкой обозначено расположение источника частиц. Подписями «ЗС», «ВС» и соответствующими прямоугольниками обозначены западная стена (ЗС) и восточная стена (ВС) городского каньона, на которых проводились измерения накопленных осаждённых частиц.

Ключевым фактором, определяющим перенос частиц к самому каньону измерений и внутри него, является направление ветра. Для оценки чувствительности результатов к этому

фактору была проведена серия из 8 экспериментов, соответствующих основным румбам розы ветров (С, СВ, В, ЮВ, Ю, ЮЗ, З, СЗ). Для каждого направления моделировался перенос частиц, представляющих фракцию PM_{10} (32 млн частиц на один эксперимент, моноразмерный тип частиц диаметром 5 мкм и плотностью 4000 кг/м³).

На рисунках 4.12а и 4.12б представлены поля ветра и вертикальные профили, иллюстрирующие радикальную перестройку структуры течения при смене направления набегающего потока.

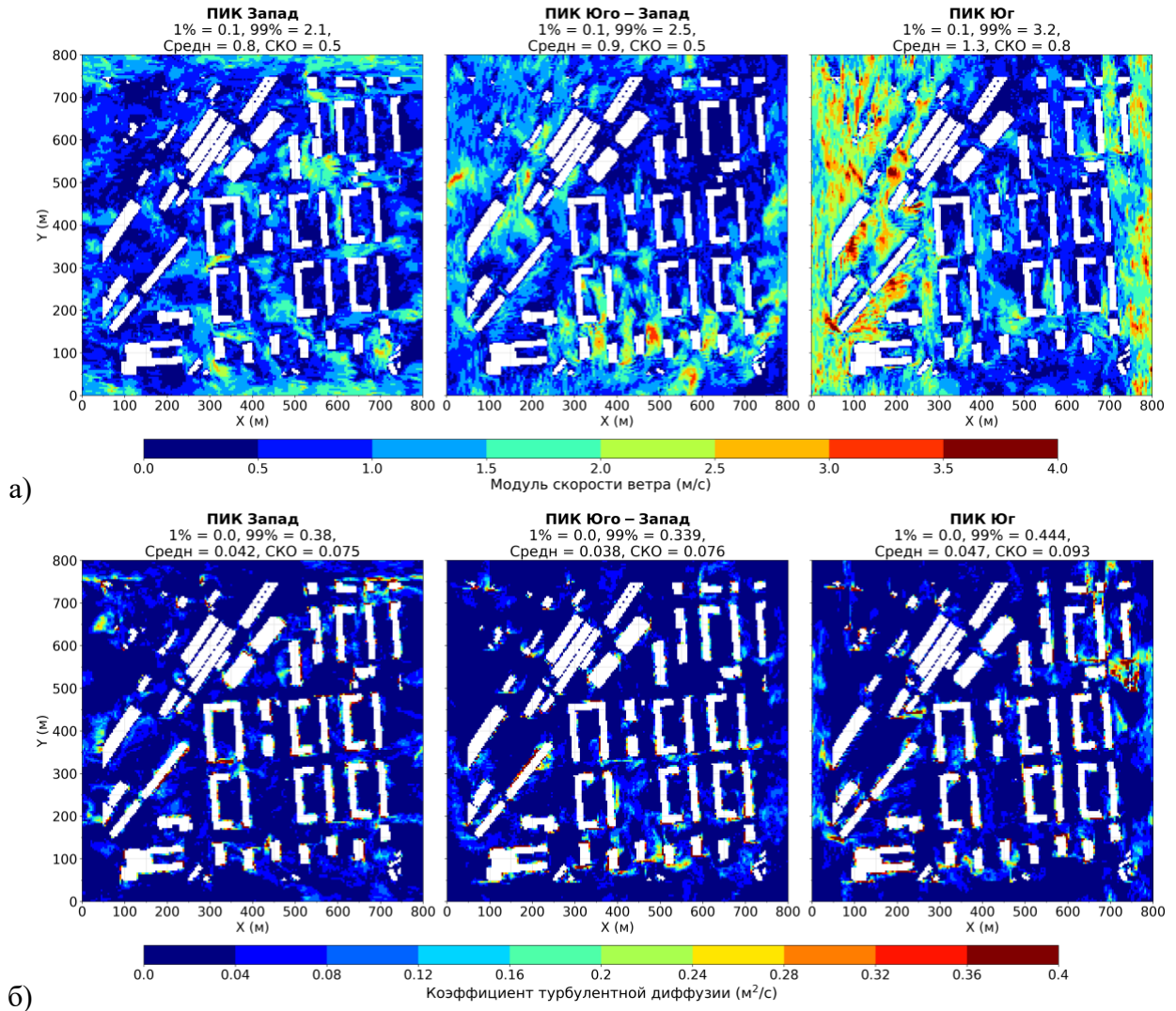


Рисунок 4.12. Поля среднего модуля скорости ветра (а) и коэффициента турбулентной диффузии (б) в слое 0-4 м для случаев З, ЮЗ и Ю ветра в конфигурации «Люблинский парк».

При ветрах, перпендикулярных оси каньона (например, Западный), внутри формируются локальные вихревые зоны и ветровое затенение. При ветрах вдоль оси (Южный) реализуется режим продольного канального течения с высокими скоростями ветра внутри застройки. Эти различия в аэродинамике напрямую влияют на то, какая из стен каньона (западная или

восточная) окажется наветренной или подветренной, что, в свою очередь, влияет на количество взаимодействий с частицами на разных высотах.

По вертикальным профилям на рис. 4.13 хорошо заметно, что при параллельных каньонам южном и северном ветрах наблюдаются максимальные средние скорости ветра на всех высотах. И наоборот, минимальные скорости ветра свойственны экспериментам, где ветер отличался от преобладающего направления каньонов на 90° – западному и восточному направлениям.

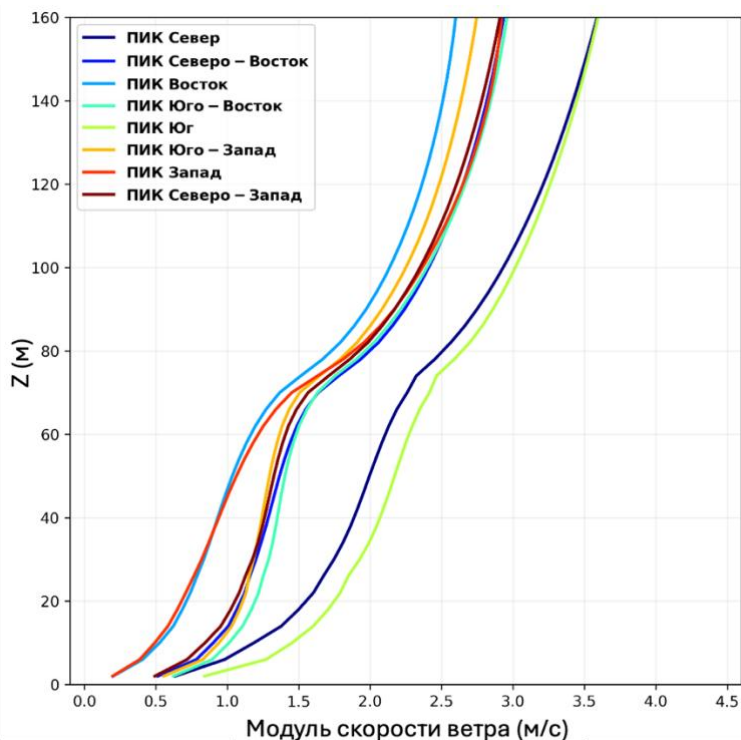
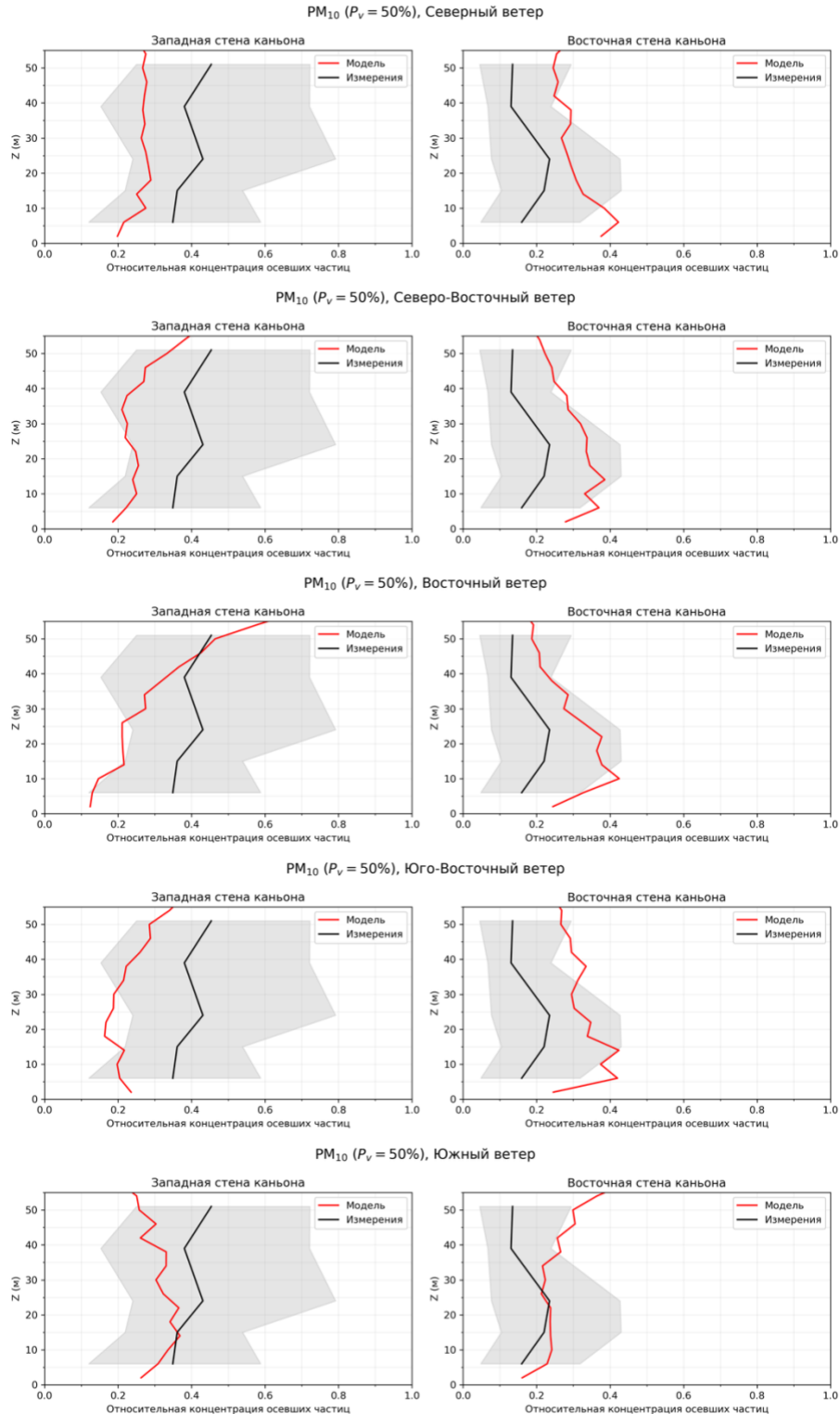


Рисунок 4.13. Средние вертикальные профили модуля скорости ветра для различных направлений ветра в конфигурации «Люблинский парк».

Поскольку абсолютные значения фоновой концентрации в период измерений неизвестны, для сопоставления использовались нормированные профили осадения. Нормировка производилась так, чтобы привести среднее значение выпадений по обеим стенам и всем высотам измерений (из модельных данных) к соответствующему значению по данным измерений. Такой подход позволяет корректно сравнивать форму профилей и относительную асимметрию между стенами.

На рисунке 4.14 показаны модельные профили осадения для различных направлений ветра в сравнении с диапазоном измерений (профиль измерений для каждого из 8 экспериментов один и тот же, меняются модельные профили). Графики демонстрируют высокую чувствительность процесса накопления осевших частиц к углу атаки ветрового

потока. Для одних направлений (например, восточный ветер) наблюдается сильное загрязнение верхней части западной стены и чистота той же части восточной. Для других (западный ветер) ситуация зеркально меняется. Формы профиля осаждения также варьируются от почти постоянных до резко убывающих или растущих с высотой.



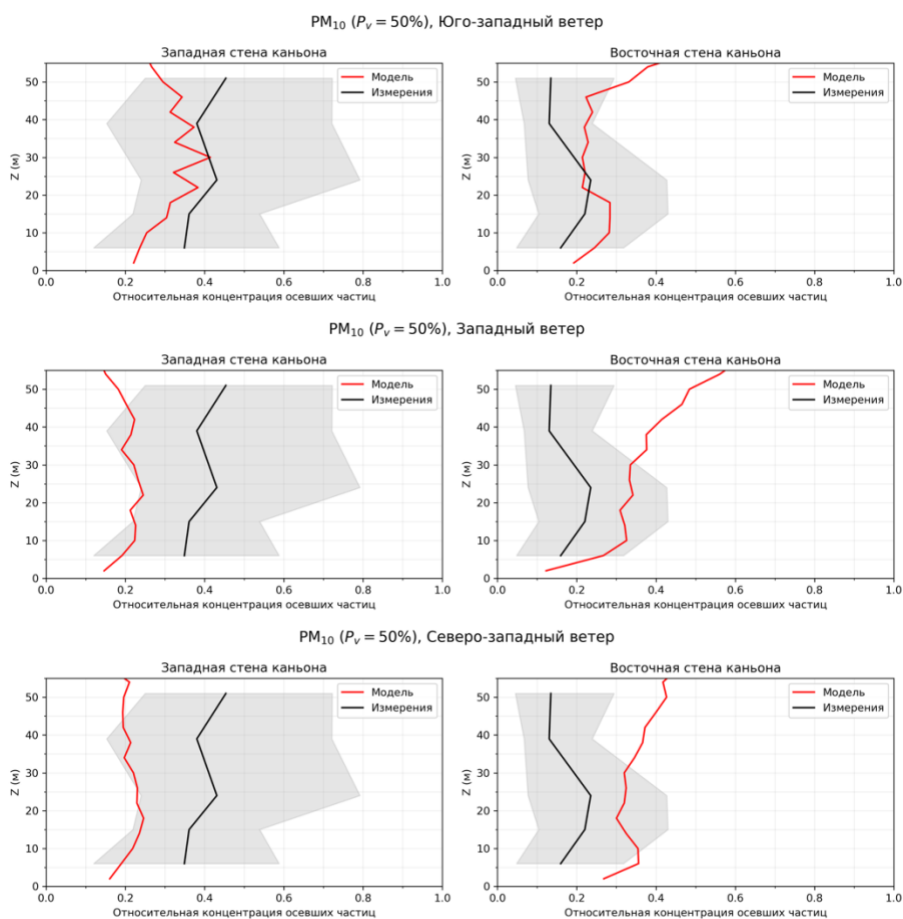


Рисунок 4.14. Вертикальные профили выпадения частиц PM_{10} по данным модели для разных направлений ветра и измерений. Серая заливка – диапазон выпадений за разные сезоны (по данным измерений).

Для попытки интегральной оценки была построена и использована роза ветров по данным измерений метеостанции ВДНХ за период накопления выпадений, измерения которых используются в данной работе (рис. 4.15).

Осреднение модельных профилей с весами, пропорциональными повторяемости ветров (красные линии на рис. 4.16), даёт результат, существенно отличающийся от наблюдаемой картины. Модельное взвешенное среднее показывает сглаженную картину с очень слабой асимметрией между стенами каньона, в то время как измерения демонстрируют более радикальные различия между ними – примерно в 2 раза.

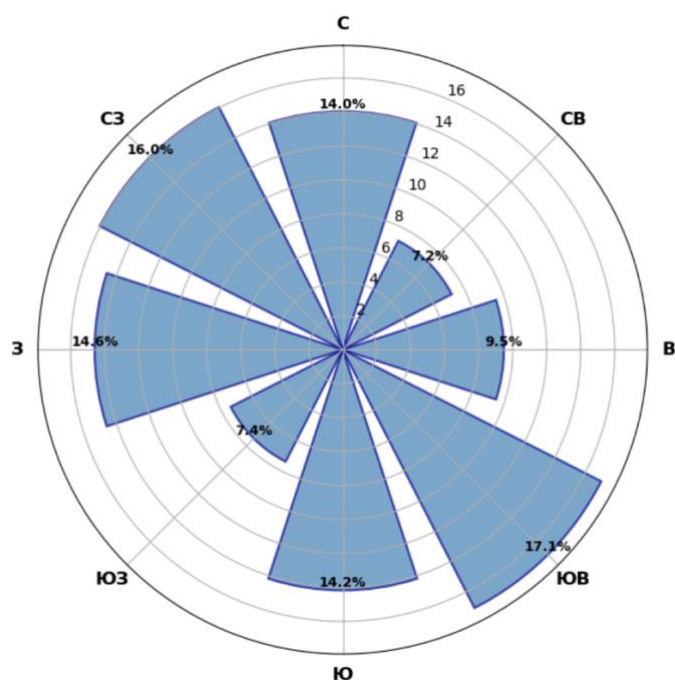


Рисунок 4.15. Роза ветров в Москве по данным метеостанции ВДНХ за период накопления собранных выпадений частиц (ноябрь 2022 – октябрь 2024).

Это расхождение объясняется тем, что осреднение по климатической розе ветров не учитывает два критически важных фактора.

Во-первых, неравномерность источников в пространстве и времени: загрязнённый воздух может поступать не со всех сторон равномерно, а преимущественно с определённых направлений (например, со стороны ближайшей стройки следующей очереди ЖК или загруженного шоссе) и непостоянно. В этом случае вклад "чистых" ветров в розу ветров размывает картину осаждения.

Во-вторых, локальная аэродинамика: ветер внутри плотной застройки может существенно отличаться от данных метеостанции ВДНХ.

Однако, детальный анализ отдельных направлений (рис. 4.14) выявляет важное совпадение. Для ветров южного и юго-западного направлений модельные профили демонстрируют хорошее качественное и количественное согласие с измерениями. Для этих направлений модель верно воспроизводит знак и величину асимметрии (восточная стена каньона загрязнена слабее западной), а также правильно описывает слабый вертикальный градиент осаждения, что является нетривиальным результатом для частиц PM_{10} .

Это позволяет выдвинуть осторожную гипотезу, что в период накопления выпадений на стенах либо основной вклад в загрязнение фасадов внесли эпизоды переноса именно с южных румбов, либо пространственно-временное распределение ключевых источников загрязнения

имеет куда более сложную структуру и не подлежит аппроксимации далёким «фоновым» источником.

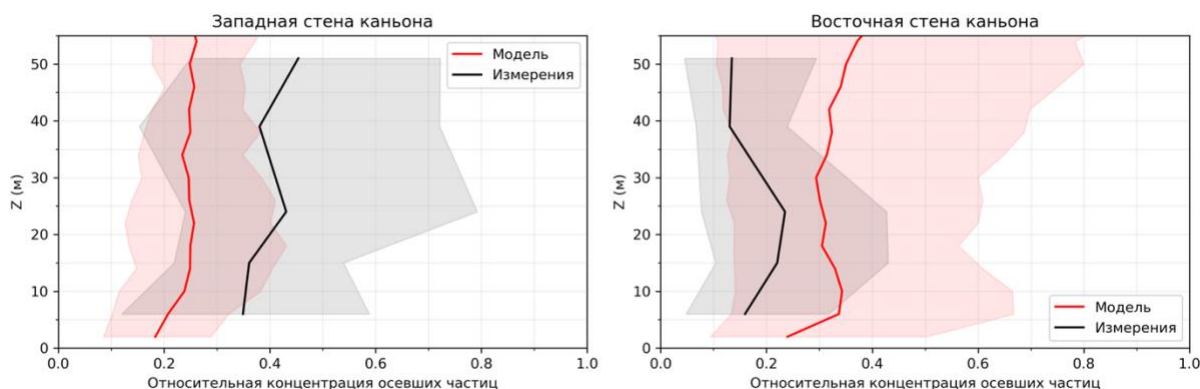


Рисунок 4.16. Вертикальные профили выпадения частиц PM_{10} по данным модели и измерений. Красная кривая – взвешенное среднее от модельных профилей с учётом повторяемости направлений ветра (рис. 4.15). Красная заливка – диапазон выпадений при разных направлениях ветра (по данным модели), серая заливка – диапазон выпадений за разные периоды (по данным измерений).

Таким образом, результаты моделирования приводят к двум важным выводам. Во-первых, модель способна описывать механизмы взаимодействия частиц со зданиями и их изменчивость, связанную с направлениями ветра, способна воспроизводить сложные эффекты (асимметрию стен, вертикальное распределение) и может служить инструментом анализа в подобных задачах. Во-вторых, процесс формирования загрязнения на фасадах в реальной застройке обладает высокой чувствительностью к граничным условиям (направлению ветра, стратификации, положению источников). Использование осредненных фоновых данных (средней розы ветров и перемешанного фонового источника) недостаточно для точного воспроизведения локальной картины загрязнения; необходим учет детализированной информации о структуре выбросов и локальной ветровой обстановке либо проведение моделирования в режиме решения обратной задачи для определения положения источников.

4.3 Выводы по главе 4

В настоящей главе было проведено комплексное исследование роли осаждения аэрозольных частиц на вертикальные поверхности зданий – одного из важных, но часто упрощаемых процессов, определяющих качество воздуха в городской среде. На основе серии численных экспериментов для более чем 40 типов частиц и сопоставления с данными натуральных наблюдений были сделаны следующие выводы.

Во-первых, доказана важность учета осаждения на вертикальные поверхности для корректного моделирования концентраций аэрозолей в городской застройке. Установлено, что стены зданий являются мощным и в ряде случаев доминирующим механизмом удаления примеси из атмосферы городского полога: они обеспечивают около 30-70% всех осажённых частиц в условиях типов застройки ЛКЗ 2, 4, 5 и 6. Модельные расчеты показали, что зависимость приповерхностной концентрации от вероятности осаждения частиц на стенах («липкости» фасада, P_v) носит нелинейный характер: даже небольшое увеличение P_v от 0% до 10% приводит к быстрому снижению концентрации на 25-30%, а переход к режиму полного поглощения ($P_v = 100\%$) снижает уровень загрязнения вдали от источника в среднем в полтора-два раза в зависимости от типа застройки и увеличивает скорость затухания шлейфа (модуль степенного показателя k) примерно на 10%. Эффект очищения наблюдается при различных метеорологических условиях, причем при переходе от нейтральной к слабоустойчивой стратификации роль стен как стока примеси возрастает.

Во-вторых, проведён сравнительный анализ факторов, влияющих на дисперсию аэрозолей. Показано, что для рассмотренных частиц фракций UFP, PM_{2.5} и PM₁₀ (с аэродинамическим диаметром не более 5 мкм – для пылицы результат показал неустойчивость, поэтому здесь не выносятся), обладающих низкой скоростью гравитационного оседания ($<10^{-2}$ м/с) и в городских условиях представляющих угрозу для здоровья человека из-за высокой проникающей способности, неопределённость, связанная с параметризацией взаимодействия со стенами, может вносить на порядок больший вклад в итоговые поля концентрации, чем вариации размера и массы частиц. Это означает, что в моделях качества воздуха на внутригородском масштабе точность описания граничных условий для частиц на вертикальных поверхностях зданий может быть более важной, чем детализация микрофизических свойств лёгких аэрозольных фракций (например, скорости гравитационного оседания), а сам учёт процессов осаждения на стены может быть критически важен в городских постановках.

В-третьих, продемонстрирована способность разработанной модели воспроизводить сложные пространственные закономерности осаждения частиц в условиях реальной городской застройки. На примере жилого комплекса «Люблинский парк» (г. Москва) показано, что модель описывает наблюдаемую высокую асимметрию загрязнения между наветренными и подветренными фасадами, а также характерное отсутствие выраженного вертикального градиента плотности осаждения. Выявленная высокая чувствительность результатов к

направлению ветра указывает на необходимость учёта детальной информации о локальных источниках и микроклимате для решения практических задач экологического мониторинга.

Важность учета осадения на вертикальные поверхности может быть сформулирована в виде следующего защищаемого положения:

Сухое осадение на вертикальные стены зданий является одним из ключевых механизмов удаления примеси из воздуха в городском пологие и обеспечивает до 70% суммарного потока осадения. Для рассмотренных моноразмерных аэрозолей с аэродинамическим диаметром не более 5 мкм (представители фракций UFP, PM_{2.5} и PM₁₀) учёт этого процесса оказывает на пространственное распределение концентраций влияние, сравнимое с эффектом вариации размера и массы частиц или превосходящее его.

Заключение

В результате проведённого диссертационного исследования, посвященного системному изучению закономерностей переноса и осаждения аэрозолей в различных морфологических типах городской среды, получены следующие основные результаты и выводы:

1) Разработана, верифицирована и внедрена в состав вихреразрешающего (LES) гидродинамического комплекса НИВЦ МГУ и ИВМ РАН лагранжева численная модель, описывающая перенос и осаждение аэрозольных частиц. Доказано, что она обеспечивает физически корректное воспроизведение пространственной структуры переноса аэрозолей и применима для решения задач микромасштабного геоэкологического анализа и исследования аэрозольного загрязнения в сложной городской среде.

2) Выявлена смена доминирующих факторов переноса аэрозолей в зависимости от структурной упорядоченности застройки. В регулярных конфигурациях с выраженной анизотропией дисперсия критически определяется зависимой от направления ветра аэродинамикой (ориентация уличных каньонов, индекс фронтальной площади). В нерегулярной среде пространственная хаотичность нивелирует упорядоченные локальные эффекты, и определяющим фактором пространственной дифференциации аэрозольного загрязнения становятся изотропные макропараметры района, независимые от направления воздушного потока.

3) Доказано, что тип локальных климатических зон (ЛКЗ) служит надежным количественным предиктором закономерностей дисперсии аэрозолей (в первую очередь для фонового загрязнения), однако при наличии локальных источников внутри застройки её необходимо дополнять метриками ориентации относительно ветра, пространственной хаотичности и анизотропии. Это открывает возможности для использования данной концепции в задачах геоэкологического районирования, территориального планирования городов и улучшения прогностических моделей.

4) Установлено, что сухое осаждение мелкодисперсных аэрозолей на вертикальные фасады зданий является мощным механизмом очищения городского воздуха, обеспечивающим до 70% суммарного бюджета стока примеси. Доказано, что для рассмотренных моноразмерных аэрозолей с аэродинамическим диаметром не более 5 мкм (представители фракций UFP, PM_{2.5} и PM₁₀) неопределённость вероятности поглощения частиц фасадами может оказывать большее влияние на изменчивость полей концентрации, чем вариация размера и массы самих частиц.

Направления дальнейшей работы. В рамках развития темы исследования предполагается создание базы данных с результатами модельных расчётов для более широкого набора метеоусловий, типов ЛКЗ и комбинаций источников. Эти данные могут быть использованы для углублённого изучения влияния параметров застройки на перенос и осаждение примесей при неблагоприятных метеоусловиях, а также для обучения моделей прогноза аэрозольного загрязнения в городе на основе машинного обучения. Планируется применение разработанной модели и в прикладных исследованиях, связанных с городским планированием и экологией.

Список литературы

1. Баренблатт Г.И., Голицын Г.С. Локальная структура развитых пыльных бурь. М.: Изд-во МГУ, 1973. 44 с.
2. Берлянд М. Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы / М. Е. Берлянд, Гидрометеиздат, 1975. 448 с.
3. Варенцов А. И., Глазунов А. В., Мортиков Е. В. Численное моделирование турбулентного переноса примесей в идеализированной городской среде // Всероссийская конференция, посвященная памяти академика А. М. Обухова «Турбулентность, динамика атмосферы и климата». М.: Физматкнига, 2022. С. 154.
4. Варенцов А.И., Имеев О.А., Глазунов А.В., Мортиков Е.В., Степаненко В.М. Численное моделирование переноса твёрдых частиц в атмосферном городском пограничном слое с использованием лагранжева подхода: физические задачи и параллельная реализация // Труды Института системного программирования РАН. 2023. Т. 35. № 4. С. 145–164.
5. Доклад «О состоянии окружающей среды в городе Москве в 2020 году» под ред. А. О. Кульбачевский, ДПиООС, 2021. 334 с.
6. Кошелева Н. Е., Шарапова А. В., Безбердая Л. А., Мушникова Н. А. Геохимический мониторинг пылевых выпадений внутри уличного каньона в юго-восточном округе Москвы Москва: МНТОРЭС им. А.С. Попова, 2024.
7. Самсонов Т. Е., Тригуб К. Картографирование локальных климатических зон Москвы // Геодезия и картография. 2018. (936). С. 14-25.
8. Семёнов О. Е. Введение в экспериментальную метеорологию и климатологию песчаных бурь / О. Е. Семёнов, под ред. О. Г. Чхетиани, И. А. Репина, Физматкнига, 2020. 448 с.
9. Старченко А. В., Данилкин Е. А., Лещинский Д. В. Численное моделирование распространения выбросов автотранспорта в уличном каньоне // Математическое моделирование. 2022. № 10 (34). С. 81–94.
10. Тасейко О. В., Сугак Е. В. Репрезентативность пунктов наблюдения при оценке качества воздуха в городской среде // Современные проблемы науки и образования. 2014. (2).
11. Abadie M., Limam K., Allard F. Indoor particle pollution: effect of wall textures on particle deposition // Building and Environment. 2001. № 7 (36). С. 821–827.
12. Al-Dabbous A. N., Kumar P. The influence of roadside vegetation barriers on airborne nanoparticles and pedestrians exposure under varying wind conditions // Atmospheric Environment. 2014. (90). С. 113–124.

13. Almohammed N., Breuer M. Modeling and simulation of particle–wall adhesion of aerosol particles in particle-laden turbulent flows // *International Journal of Multiphase Flow*. 2016. (85). C. 142–156.
14. Altmeyden J., Sommerfeld H., Koch C., Staudacher S. Experimental and numerical investigation into the effect of surface roughness on particle rebound // *Frontiers in Mechanical Engineering*. 2022. (8). C. 918708.
15. Amouei M. Classification of urban morphology and its relationship with air pollution using deep learning: Master's thesis. Enschede: University of Twente, 2023.
16. Bakels L., Tatsii D., Tipka A.. FLEXPART v11: an advanced particle dispersion model // *Geoscientific Model Development*. 2024.
17. Baklanov A., Zhang Y. Advances in air quality modeling and forecasting // *Global Transitions*. 2020. (2). C. 261–270.
18. Batchelor G. K. Diffusion from sources in a turbulent boundary layer под ред. W. Fiszdon, Oxford: Pergamon Press, 1965.C. 31–40.
19. Batty M. Spatial Entropy // *Geographical Analysis*. 1974. № 1 (6). C. 1–31.
20. Bechtel B., Alexander P., Böhner J., Ching J., Conrad O., Feddema J., Mills G., See L., Stewart I. Mapping Local Climate Zones for a Worldwide Database of the Form and Function of Cities // *ISPRS International Journal of Geo-Information*. 2015. № 1 (4). C. 199–219.
21. Birmili W., Rehn J., Vogel A., Boehlke C., Weber K., Rasch F. Micro-scale variability of urban particle number and mass concentrations in Leipzig, Germany // *Meteorologische Zeitschrift*. 2013. C. 155–165.
22. Blocken B. Computational Fluid Dynamics for urban physics: Importance, scales, possibilities, limitations and ten tips and tricks towards accurate and reliable simulations // *Building and Environment*. 2015. (91). C. 219–245.
23. Blocken B. LES over RANS in building simulation for outdoor and indoor applications: A foregone conclusion? // *Building Simulation*. 2018. № 5 (11). C. 821–870.
24. Boeing G. Urban spatial order: street network orientation, configuration, and entropy // *Applied Network Science*. 2019. № 1 (4). C. 67.
25. Borck R., Schrauth P. Population density and urban air quality // *Regional Science and Urban Economics*. 2021. № C (86).
26. Boughton B. A., Delaurentis J. M., Dunn W. E. A stochastic model of particle dispersion in the atmosphere // *Boundary-Layer Meteorology*. 1987. № 1 (40). C. 147–163.

27. Brach R. M., Dunn P. F. A Mathematical Model of the Impact and Adhesion of Microspheres // *Aerosol Science and Technology*. 1992. № 1 (16). C. 51–64.
28. Branford S., Coceal O., Thomas T. G., Belcher S. E. Dispersion of a point source plume in a simulated urban environment // *Boundary-Layer Meteorology*. 2011. (140). C. 1-24.
29. Britter R. E., Hanna S. R. FLOW AND DISPERSION IN URBAN AREAS // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2003. № Volume 35, 2003 (35). C. 469–496.
30. Bruse M., Fleer H. Simulating surface–plant–air interactions inside urban environments with a three-dimensional numerical model // *Environmental Modelling & Software*. 1998. № 13 (3–4). C. 373–384.
31. Budd W. F. *The Drifting of Nonuniform Snow Particles* 1966.
32. Chahardoli S., Khakzand M., Faizi M., Siavashi M. Numerical analysis of the effect of roof types and porch on particle dispersion and deposition around a low-rise building // *Journal of Building Engineering*. 2022. (53). C. 104533.
33. Chen M., Dai F., Yang B. Effects of neighborhood green space on PM2.5 mitigation: evidence from five megacities in China // *Building and Environment*. 2019. (156). C. 33-45.
34. Cheng W.-C., Fu T.-M. Turbulent transport and dry deposition of air pollutants over real urban surfaces: A building-resolving large-eddy simulation study // *Sustainable Cities and Society*. 2025. C. 104595.
35. Cherin N., Roustan Y., Musson-Genon L., Seigneur C. Modelling atmospheric dry deposition in urban areas using an urban canopy approach // *Geoscientific Model Development*. 2015. № 3 (8). C. 893–910.
36. Ching J., Mills G., Bechtel B., See L., Feddema J., Wang X., Ren C., Brousse O., Martilli A., Neophytou M., Mouzourides P., Stewart I., Hanna A., Ng E., Foley M., Alexander P., Aliaga D., Niyogi D., Shreevastava A., Bhalachandran P., Masson V., Hidalgo J., Fung J., Andrade M., Baklanov A., Dai W., Milcinski G., Demuzere M., Brunzell N., Pesaresi M., Miao S., Mu Q., Chen F., Theeuwes N. WUDAPT: An Urban Weather, Climate, and Environmental Modeling Infrastructure for the Anthropocene // *Bulletin of the American Meteorological Society*. 2018. № 9 (99). C. 1907-1924.
37. Chubarova N. E., Vogel H., Androsova E. E., Kirsanov A. A., Popovicheva O. B., Vogel B., Rivin G. S. Columnar and surface urban aerosol in the Moscow megacity according to measurements and simulations with the COSMO-ART model // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2022. (22). C. 10443-10466.

38. Claus J., Castro I. P., Thomas T. G. Wind-direction effects on urban-type flows // *Boundary-Layer Meteorology*. 2012. (142). C. 265-284.
39. Cohen A. J., Brauer M., Burnett R., Anderson H. R., Frostad J., Estep K., Balakrishnan K., Brunekreef B., Dandona L., Dandona R., Feigin V., Freedman G., Hubbell B., Jobling A., Kan H., Knibbs L., Liu Y., Martin R., Morawska L., Pope C. A. Estimates and 25-year trends of the global burden of disease attributable to ambient air pollution: an analysis of data from the Global Burden of Diseases Study 2015 // *The Lancet*. 2017. № 10082 (389). C. 1907–1918.
40. Costa D., Malet J., Géhin E. Dry aerosol particle deposition on indoor surfaces: Review of direct measurement techniques // *Aerosol Science and Technology*. 2022. № 3 (56). C. 261–280.
41. Debolskiy A. V., Mortikov E. V., Glazunov A. V., Lüpkes C. Evaluation of Surface Layer Stability Functions and Their Extension to First Order Turbulent Closures for Weakly and Strongly Stratified Stable Boundary Layer // *Boundary-Layer Meteorology*. 2023.
42. Demuzere M., Kittner J., Bechtel B. LCZ Generator: A Web Application to Create Local Climate Zone Maps // *Frontiers in Environmental Science*. 2021. (9). C. 637455.
43. Demuzere M., Kittner J., Martilli A., Mills G., Moede C., Stewart I. D., van Vliet J., Bechtel B. A global map of local climate zones to support earth system modelling and urban-scale environmental science // *Earth System Science Data*. 2022. № 8 (14). C. 3835–3873.
44. Droste A. M., Steeneveld G. J., Holtslag A. A. M. Introducing the urban wind island effect // *Environmental Research Letters*. 2018. № 9 (13). C. 094007.
45. Du Y., Isaxon C., Roldin P., Mattisson K., Karttunen S., Li X., Malmqvist E., Järvi L. Large-eddy simulation of aerosol concentrations in a realistic urban environment: Model validation and transport mechanism // *Environmental Pollution*. 2024. (358). C. 124475.
46. Durbin P. A. Stochastic differential equations and turbulent dispersion // 1983.
47. Engel B. The Concept of the Socialist City: Plans and Patterns of Soviet Urbanism // *International Planning History Society Proceedings*. 2022. № 1 (19). C. 663–678.
48. Essamlali I., Nhaila H., El Khaili M. Supervised Machine Learning Approaches for Predicting Key Pollutants and for the Sustainable Enhancement of Urban Air Quality: A Systematic Review // *Sustainability*. 2024. (16).
49. Farmer D. K., Boedicker E. K., DeBolt H. M. Dry Deposition of Atmospheric Aerosols: Approaches, Observations, and Mechanisms // *Annual Review of Physical Chemistry*. 2021. (72). C. 375-397.
50. Fenger J. Urban air quality // *Atmospheric Environment*. 1999. № 29 (33). C. 4877–4900.

51. Flesch T. K., Wilson J. D., Yee E. Backward-Time Lagrangian Stochastic Dispersion Models and Their Application to Estimate Gaseous Emissions 1995.
52. Fletcher N. H. The Physics of Rainclouds / N. H. Fletcher, Cambridge University Press, 1962. 418 c.
53. Gál T., Alinasab N., Abdulhaq H. A., Skarbit N. A Structured Literature Review of the Application of Local Climate Zones (LCZ) in Urban Climate Modelling // Earth. 2025. № 1 (7). C. 3.
54. Germano M., Piomelli U., Moin P., Cabot W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model // Physics of Fluids A: Fluid Dynamics. 1991. № 7 (3). C. 1760–1765.
55. Giardina M., Donateo A., Buffa P., Contini D., Cervone A., Lombardo C., Rocchi F. Atmospheric dry deposition processes of particles on urban and suburban surfaces: Modelling and validation works // Atmospheric Environment. 2019. (214). C. 116857.
56. Giudice A. L., Nuca R., Preziosi L., Coste N. Wind-blown particulate transport: A review of computational fluid dynamics models // Mathematics in Engineering. 2019. № 3 (1). C. 508–547.
57. Glazunov A., Rannik Ü., Stepanenko V., Lykosov V., Auvinen M., Vesala T., Mammarella I. Large-eddy simulation and stochastic modeling of Lagrangian particles for footprint determination in the stable boundary layer // Geoscientific Model Development. 2016. № 9 (9). C. 2925–2949.
58. Glazunov A. V. Numerical simulation of turbulence and transport of fine particulate impurities in street canyons // Numerical Methods and Programming (Vychislitel'nye Metody i Programirovanie). 2018. (19). C. 17–37.
59. Glazunov A. V., Debolskiy A. V., Mortikov E. V. Turbulent Length Scale for Multilayer RANS Model of Urban Canopy and Its Evaluation Based on Large-Eddy Simulations // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2021. № 4 (8). C. 100–116.
60. Glazunov A., Mortikov E., Debolskiy A. Studies of Stable Stratification Effect on Dynamic and Thermal Roughness Lengths of Urban-Type Canopy Using Large-Eddy Simulation 2022.
61. Gosman A. D., Ioannides E. Aspects of Computer Simulation of Liquid-Fueled Combustors // Journal of Energy. 1983. № 6 (7). C. 482–490.
62. Gouesbet G., Berlemont A. Eulerian and Lagrangian approaches for predicting the behaviour of discrete particles in turbulent flows // Progress in Energy and Combustion Science. 1999. № 2 (25). C. 133–159.

63. Grimmond C. S. B., Oke T. R. Aerodynamic Properties of Urban Areas Derived from Analysis of Surface Form // *Journal of Applied Meteorology*. 1999. № 9 (38). C. 1262–1292.
64. Grylls T., Le Cornec C. M. A., Salizzoni P., Soulhac L., Stettler M. E. J., van Reeuwijk M. Evaluation of an operational air quality model using large-eddy simulation // *Atmospheric Environment: X*. 2019. (3). C. 100041.
65. Guha A. Transport and Deposition of Particles in Turbulent and Laminar Flow // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2008. (40). C. 311-343.
66. Haghifard H. R., Tavakol M. M., Ahmadi G. Numerical study of fluid flow and particle dispersion and deposition around two inline buildings // *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. 2018. (179). C. 385–406.
67. Hang J., Li Y., Sandberg M., Buccolieri R., Di Sabatino S. The influence of building height variability on pollutant dispersion and pedestrian ventilation in idealized high-rise urban areas // *Building and Environment*. 2012. (56). C. 346–360.
68. Hidalgo-García D., Rezapouraghdam H. Local urban climate zones, environmental pollution, disease prevalence and mortality: Evidence from Barcelona // *Cities*. 2026. (168). C. 106433.
69. Hong W., Wang B., Liu Y., Li H. Numerical study of the fine particle deposition behaviors on three-dimensional random rough walls // *Powder Technology*. 2020. (375). C. 233–243.
70. Horn M., Schmid H.-J. A comprehensive approach in modeling Lagrangian particle deposition in turbulent boundary layers // *Powder Technology*. 2008. № 3 (186). C. 189–198.
71. Huilier D. G. F. An Overview of the Lagrangian Dispersion Modeling of Heavy Particles in Homogeneous Isotropic Turbulence and Considerations on Related LES Simulations // *Fluids*. 2021. № 4 (6). C. 145.
72. Ielpo P., Conry P., Genga A., Buccolieri R., Giotta L., Di Nicola F., Vincenti M. L., Valli L., Fernando H. J. S., Di Sabatino S. Aerosol tracers deposition in a controlled field experiment: role of surface building materials // *IMEKO TC-4 International Symposium on Metrology for Archaeology and Cultural Heritage*. 2020. C. 486–490.
73. III C. A. P., Dockery D. W. Health Effects of Fine Particulate Air Pollution: Lines that Connect // *Journal of the Air & Waste Management Association*. 2006.
74. Janhäll S. Review on urban vegetation and particle air pollution – Deposition and dispersion // *Atmospheric Environment*. 2015. (105). C. 130–137.
75. Jiang R., Xie C., Man Z., Afshari A., Che S. LCZ method is more effective than traditional LUCC method in interpreting the relationship between urban landscape and atmospheric particles // *Science of The Total Environment*. 2023. (869). C. 161677.

76. Johansen S. T. The deposition of particles on vertical walls // *International Journal of Multiphase Flow*. 1991. № 3 (17). C. 355–376.
77. Johnson A. J., Davidson C. I. Estimating dry deposition of atmospheric aerosols to urban surfaces by rain washoff // *Atmospheric Environment*. 2023. (293). C. 119466.
78. Jonsson L., Karlsson E., Jönsson P. Aspects of particulate dry deposition in the urban environment // *Journal of Hazardous Materials*. 2008. № 1 (153). C. 229–243.
79. Kadantsev E., Mortikov E., Zilitinkevich S. The resistance law for stably stratified atmospheric planetary boundary layers 2021.
80. Kadaverugu R., Sharma A., Matli C., Biniwale R. High Resolution Urban Air Quality Modeling by Coupling CFD and Mesoscale Models: a Review // *Asia-Pacific Journal of Atmospheric Sciences*. 2019. № 4 (55). C. 539–556.
81. Kakosimos K. E., Hertel O., Ketzler M., Berkowicz R. Operational Street Pollution Model – a review // *Environmental Chemistry*. 2010.
82. Kampa M., Castanas E. Human health effects of air pollution // *Environmental Pollution*. 2008. № 2 (151). C. 362–367.
83. Karra S., Malki-Epshtein L., Neophytou M. The Dispersion of Traffic Related Pollutants Across a Non-Homogeneous Street Canyon // *Procedia Environmental Sciences*. 2011. (4). C. 25–34.
84. Kastner-Klein P., Berkowicz R., Britter R. The influence of street architecture on flow and dispersion in street canyons // *Meteorology and Atmospheric Physics*. 2004. № 1 (87). C. 121–131.
85. Kastner-Klein P., Plate E. J. Wind-tunnel study of concentration fields in street canyons // *Atmospheric Environment*. 1999. № 24 (33). C. 3973–3979.
86. Ke Sun, Lin Lu, Hai Jiang Modelling of Particle Deposition and Rebound Behaviour on Ventilation Ducting Wall Using an Improved Wall Model // *Indoor and Built Environment*. 2011. № 3 (20). C. 300–312.
87. Keller C. A., Knowland K. E., Duncan B. N., Liu J., Anderson D. C., Das S., Lucchesi R. A., Lundgren E. W., Nicely J. M., Nielsen E., Ott L. E., Saunders E., Strode S. A., Wales P. A., Jacob D. J., Pawson S. Description of the NASA GEOS Composition Forecast Modeling System GEOS-CF v1.0 // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*. 2021.
88. Kim Y., Lugon L., Maison A., Sarica T., Roustan Y., Valari M., Zhang Y., André M., Sartelet K. MUNICH v2.0: a street-network model coupled with SSH-aerosol (v1.2) for multi-pollutant modelling // *Geoscientific Model Development*. 2022. (15). C. 7371-7391.

89. Klemm O., Ahrens A., Arnswald M., Bethke R., Berger D. F., Blankenhaus K., Blauth L., Breuer B., Buchholz S., Burek F., Ehrnsperger L., Funken S., Henninger E., Hohl J., Jöllenbeck N., Kirgasser P., Kuhls M., Paas B., Roters L. A., Schaller C., Schlüter H. The Impact of Traffic and Meteorology on Urban Particle Mass and Particle Number Concentrations: Student-Led Studies Using Mobile Measurements before, during, and after the COVID-19 Pandemic Lockdowns // *Atmosphere*. 2022. № 1 (13). C. 62.
90. Kondo J., Kanechika O., Yasuda N. Heat and Momentum Transfers under Strong Stability in the Atmospheric Surface Layer 1978.
91. Kouznetsov R., Sofiev M., Uppstu A., Hänninen R. Deposition velocity concept does not apply to fluxes of ambient aerosol // *Geoscientific Model Development*. 2026. № 5 (19). C. 1833–1847.
92. Kurppa M., Hellsten A., Roldin P., Kokkola H., Tonttila J., Auvinen M., Kent C., Kumar P., Maronga B., Järvi L. Implementation of the sectional aerosol module SALSA2.0 into the PALM model system 6.0: model development and first evaluation // *Geoscientific Model Development*. 2019. (12). C. 1403-1419.
93. Kuznetsova I. N. The effect of meteorology on air pollution in Moscow during the summer episodes of 2010 // *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*. 2012. № 5 (48). C. 504–515.
94. Lai A. C. K., Nazaroff W. W. Modeling indoor particle deposition from turbulent flow onto smooth surfaces // *Journal of Aerosol Science*. 2000. № 4 (31). C. 463-476.
95. Li Z., Roy D. P., Zhang H. K., Vermote E. F., Huang H.. Evaluation of Landsat-8 and Sentinel-2A Aerosol Optical Depth Retrievals across Chinese Cities and Implications for Medium Spatial Resolution Urban Aerosol Monitoring // *Remote Sensing*. 2019. № 2 (11). C. 122.
96. Li Z., Ming T., Liu S., Peng C., de Richter R., Li W., Zhang H., Wen C.-Y. Review on pollutant dispersion in urban areas-part A: Effects of mechanical factors and urban morphology // *Building and Environment*. 2021. (190). C. 107534.
97. Liao J., Wang T., Wang X., Xie M., Jiang Z., Huang X., Zhu J. Impacts of different urban canopy schemes in WRF/Chem on regional climate and air quality in Yangtze River Delta, China // *Atmospheric Research*. 2014. (145-146). C. 226-243.
98. Lim H. D., Hertwig D., Grylls T. Pollutant dispersion by tall buildings: Laboratory experiments and Large-Eddy Simulation // *Experiments in Fluids*. 2022. № 6 (63). C. 92.
99. Lin Y., An X., Yuan J., Yuan J., Chen B. The impact of the urban landscape on PM_{2.5} from JK3 perspective: A case study of Shenyang // *Urban Climate*. 2024. (57). C. 102107.

100. Liu C., Ahmadi G. Transport and deposition of particles near a building model // *Building and Environment*. 2006. № 6 (41). C. 828–836.
101. Lu J., Nazarian N., Hart M. A., Krayenhoff E. S., Martilli A. Novel Geometric Parameters for Assessing Flow Over Realistic Versus Idealized Urban Arrays // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*. 2023. № 7 (15). C. e2022MS003287.
102. Lu T., Marshall J. D., Zhang W., Hystad P., Kim S.-Y., Bechle M. J., Demuzere M., Hankey S. National Empirical Models of Air Pollution Using Microscale Measures of the Urban Environment // *Environmental Science & Technology*. 2021.
103. Mailler S., Menut L., Khvorostyanov D., Valari M., Couvidat F., Siour G., Turquety S., Briant R., Tuccella P., Bessagnet B., Colette A., Létinois L., Markakis K., Meleux F. CHIMERE-2017: from urban to hemispheric chemistry-transport modeling // *Geoscientific Model Development*. 2017. № 6 (10). C. 2397–2423.
104. Maleki M., Asadi M., Zare Naghadehi S., Khosravi A., Wang J., Stewart I. D., Shakeryari M. Detecting local climate zone change and its effects on PM10 distribution using fuzzy machine learning in Tehran, Iran // *Urban Climate*. 2023. (49). C. 101506.
105. Marć M., Tobiszewski M., Zabiegała B., de la Guardia M., Namieśnik J. Current air quality analytics and monitoring: A review // *Analytica Chimica Acta*. 2015. (853). C. 116–126.
106. Marinov M. B., Topalov I., Gieva E., Nikolov G. Air quality monitoring in urban environments 2016.C. 443–448.
107. Mariraj Mohan S. An overview of particulate dry deposition: measuring methods, deposition velocity and controlling factors // *International Journal of Environmental Science and Technology*. 2016. № 1 (13). C. 387–402.
108. Marley N. A., Gaffney J. S. *Introduction to Urban Aerosols and Their Impacts* 2006.
109. Maro D., Connan O., Flori J. P., Hébert D., Mestayer P., Olive F., Rosant J. M., Rozet M., Sini J. F., Solier L. Aerosol dry deposition in the urban environment: Assessment of deposition velocity on building facades // *Journal of Aerosol Science*. 2014. (69). C. 113–131.
110. Maronga B., Banzhaf S., Burmeister C., Esch T., Forkel R., Fröhlich D., Fuka V., Gehrke K. F., Geletič J., Giersch S., Gronemeier T., Groß G., Heldens W., Hellsten A., Hoffmann F., Inagaki A., Kadasch E., Kanani-Sühring F., Ketelsen K., Khan B. A., Knigge C., Knoop H., Krč P., Kurppa M., Maamari H., Matzarakis A., Mauder M., Pallasch M., Pavlik D., Pfafferoth J., Resler J., Rissmann S., Russo E., Salim M., Schrempf M., Schwenkel J., Seckmeyer G., Schubert S., Sühring M., von Tils R., Vollmer L., Ward S., Witha B., Wurps H., Zeidler J., Raasch S.

- Overview of the PALM model system 6.0 // *Geoscientific Model Development*. 2020. (13). C. 1335-1372.
111. Milliez M., Carissimo B. Numerical simulations of pollutant dispersion in an idealized urban area, for different meteorological conditions // *Boundary-Layer Meteorology*. 2007. № 2 (122). C. 321–342.
 112. Minier J.-P., Peirano E. The pdf approach to turbulent polydispersed two-phase flows // *Physics Reports*. 2001. № 1 (352). C. 1–214.
 113. Mohajeri N., Gudmundsson A. Quantifying the Differences in Geometry and Size Distributions of Buildings Within Cities // *Nexus Network Journal*. 2014. № 2 (16). C. 417–436.
 114. Monks P. S., Granier C., Fuzzi S., Stohl A., Williams M. L., Akimoto H., Amann M., Baklanov A., Baltensperger U., Bey I., Blake N., Blake R. S., Carslaw K., Cooper O. R., Dentener F., Fowler D., Fragkou E., Frost G. J., Generoso S., Ginoux P. Atmospheric composition change – global and regional air quality // *Atmospheric Environment*. 2009. (43). C. 5268-5350.
 115. Morsi S. A., Alexander A. J. An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems // *Journal of Fluid Mechanics*. 1972. № 2 (55). C. 193–208.
 116. Mortikov E. V., Glazunov A. V., Lykosov V. N. Numerical study of plane Couette flow: turbulence statistics and the structure of pressure–strain correlations // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. 2019. № 2 (34). C. 119–132.
 117. Nagel T., Schoetter R., Bourgin V., Masson V., Onofri E. Drag Coefficient and Turbulence Mixing Length of Local Climate Zone-Based Urban Morphologies Derived Using Obstacle-Resolving Modelling // *Boundary-Layer Meteorology*. 2023.
 118. Nazarian N., Lu J., Lipson M. J., Hart M. A., Liu S., Krayenhoff E. S., Blunn L., Martilli A. UrbanTALES: A Large-Eddy Simulation Dataset for Urban Canopy Layer Turbulence and Parameterization // *Bulletin of the American Meteorological Society*. 2025.
 119. Nordam T., Kristiansen R., Nepstad R., van Sebille E., Booth A. M. A comparison of Eulerian and Lagrangian methods for vertical particle transport in the water column // *Geoscientific Model Development*. 2023.
 120. Nourani S., Villalobos A. M., Jorquera H. Indoor and outdoor PM_{2.5} in schools of Santiago, Chile: influence of local climate zone (JIK3) environment // *Air Quality, Atmosphere & Health*. 2025. № 4 (18). C. 927–940.
 121. Oke T. R. Street design and urban canopy layer climate // *Energy and Buildings*. 1988. № 1 (11). C. 103–113.

122. Pantusheva M., Mitkov R., Hristov P. O., Petrova-Antonova D. Air Pollution Dispersion Modelling in Urban Environment Using CFD: A Systematic Review // *Atmosphere*. 2022. (13). C. 1640.
123. Penenko A., Penenko V., Tsvetova E., Gochakov A., Pyanova E., Konopleva V. Sensitivity Operator Framework for Analyzing Heterogeneous Air Quality Monitoring Systems // *Atmosphere*. 2021. № 12 (12). C. 1697.
124. Pesava P., Aksu R., Toprak S., Horvath H., Seidl S. Dry deposition of particles to building surfaces and soiling // *Science of The Total Environment*. 1999. № 1 (235). C. 25–35.
125. Petroff A., Zhang L. Development and validation of a size-resolved particle dry deposition scheme for application in aerosol transport models // *Geoscientific Model Development*. 2010. № 2 (3). C. 753–769.
126. Pleim J. E., Ran L., Saylor R. D., Willison J., Binkowski F. S. A New Aerosol Dry Deposition Model for Air Quality and Climate Modeling // *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*. 2022. (14). C. e2022MS003050.
127. Plotnick R. E., Gardner R. H., Hargrove W. W., Prestegard K., Perlmutter M. Lacunarity analysis: A general technique for the analysis of spatial patterns // *Physical Review E*. 1996. № 5 (53). C. 5461–5468.
128. Ponomarev N., Yushkov V., Elansky N. Air Pollution in Moscow Megacity: Data Fusion of the Chemical Transport Model and Observational Network // *Atmosphere*. 2021. № 3 (12). C. 374.
129. Pope S. B. *Turbulent Flows* // Cambridge Aspire website [Электронный ресурс]. URL: <https://www.cambridge.org/highereducation/books/turbulent-flows/C58EFF59AF9B81AE6CFAC9ED16486B3A> (дата обращения: 21.09.2025).
130. Popovicheva O. B., Chichaeva M. A., Kovach R. G., Zhdanova E. Yu., Stepanenko V. M., Varentsov A., Kasimov N. S. Impact of Wave COVID-19 Responses on Black Carbon Air Pollution in Moscow Megacity Background // *Aerosol and Air Quality Research*. 2024. № 4 (24). C. 230266.
131. Rémy S., Metzger S., Huijnen V., Williams J. E., Flemming J.. An improved representation of aerosol in the ECMWF IFS-COMPO 49R1 through the integration of EQSAM4Climv12 – a first attempt at simulating aerosol acidity // *Geoscientific Model Development*. 2024. № 21 (17). C. 7539–7567.
132. Reynolds A. M., Cohen J. E. Stochastic simulation of heavy-particle trajectories in turbulent flows // *Physics of Fluids*. 2002. № 1 (14). C. 342–351.
133. Rodean H. *Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion* / H. Rodean, 1996.

134. Rybarczyk Y., Zalakeviciute R. Machine Learning Approaches for Outdoor Air Quality Modelling: A Systematic Review // *Applied Sciences*. 2018. (8). C. 2570.
135. Sawford B. L. Recent developments in the Lagrangian stochastic theory of turbulent dispersion // *Boundary-Layer Meteorology*. 1993. № 1 (62). C. 197–215.
136. Sawford B. L. Reynolds number effects in Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion // *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*. 1991. № 6 (3). C. 1577–1586.
137. Seinfeld J. H., Pandis S. N. *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change* / J. H. Seinfeld, S. N. Pandis, John Wiley & Sons, 2016. 1146 c.
138. Shi Y., Ren C., Lau K. K.-L., Ng E. Investigating the influence of urban land use and landscape pattern on PM_{2.5} spatial variation using mobile monitoring and WUDAPT // *Landscape and Urban Planning*. 2019. (189). C. 15–26.
139. Shui T., Cao L., Xiao T., Zhang S. Influence of Building-Height Variability on Urban Ventilation and Pollutant Dispersion Characteristics // *Atmosphere*. 2025. № 5 (16). C. 614.
140. Simon H., Heusinger J., Sinsel T., Weber S., Bruse M. Implementation of a Lagrangian Stochastic Particle Trajectory Model (LaStTraM) to Simulate Concentration and Flux Footprints Using the Microclimate Model ENVI-Met // *Atmosphere*. 2021. № 8 (12). C. 977.
141. Slinn W. G. N. Predictions for particle deposition to vegetative canopies // *Atmospheric Environment* (1967). 1982. № 7 (16). C. 1785–1794.
142. Sofiev M., Siljamo P., Valkama I., Ilvonen M., Kukkonen J. A Dispersion Modelling System SILAM and Its Evaluation against ETEX Data // *Atmospheric Environment*. 2006. (40). C. 674-685.
143. Sokhi R. S., Moussiopoulos N., Baklanov A., Bartzis J., Coll I., Finardi S., Friedrich R., Geels C., Grönholm T., Halenka T., Ketzler M., Maragkidou A., Matthias V., Moldanova J., Ntziachristos L., Schäfer K., Suppan P., Tsegas G., Carmichael G., Franco V., Hanna S., Jalkanen J.-P., Velders G. J. M., Kukkonen J. Advances in air quality research – current and emerging challenges // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2022. (22). C. 4615-4703.
144. Soulhac L., Salizzoni P., Cierco F.-X., Perkins R. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; PART I, Presentation of the model // *Atmospheric Environment*. 2011. № 39 (45). C. 7379-7395.
145. Soulsby R. L., Wainwright B. L. S. A. A criterion for the effect of suspended sediment on near-bottom velocity profiles // *Journal of Hydraulic Research*. 1987. № 3 (25). C. 341–356.

146. Stein A. F., Draxler R. R., Rolph G. D., Stunder B. J. B., Cohen M. D., Ngan F. NOAA's HYSPLIT Atmospheric Transport and Dispersion Modeling System // *Bulletin of the American Meteorological Society*. 2015. (96). C. 2059-2077.
147. Stewart I. D., Oke T. R. *Local Climate Zones for Urban Temperature Studies* 2012.
148. Suiazova V. I., Debolskiy A. V., Mortikov E. V. Study of Surface Layer Characteristics in the Presence of Suspended Snow Particles Using Observational Data and Large Eddy Simulation // *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*. 2024. № 2 (60). C. 158–167.
149. Sushanth S. J., Madhumathi A., Rajasekar E. Effect of local climate zone morphology on ventilation availability and thermal performance // *Advances in Building Energy Research*. 2025.
150. Sutton O. G. A theory of eddy diffusion in the atmosphere // *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*. 1932.
151. Sützl B. S., Rooney G. G., Reeuwijk M. van Drag Distribution in Idealized Heterogeneous Urban Environments // *Boundary-Layer Meteorology*. 2021. № 2 (178). C. 225–248.
152. Talebmoustaph C., Fede P., Simonin O., Pallud M., Maheshwari P. Stochastic Lagrangian wall deposition model for RANS prediction of deposition in turbulent gas–solid flows // *International Journal of Multiphase Flow*. 2024. (178). C. 104900.
153. Tan X., Han L., Zhang X., Zhou W., Li W., Qian Y. A review of current air quality indexes and improvements under the multi-contaminant air pollution exposure // *Journal of Environmental Management*. 2021. (279). C. 111681.
154. Tarasova M. A., Debolskiy A. V., Mortikov E. V., Varentsov M. I., Glazunov A. V., Stepanenko V. M. On the Parameterization of the Mean Wind Profile for Urban Canopy Models // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2024. № 7 (45). C. 3198–3210.
155. Thomson D. J. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows // *Journal of Fluid Mechanics*. 1987. (180). C. 529–556.
156. Thomson D. J., Wilson J. D. *History of Lagrangian Stochastic Models for Turbulent Dispersion*. 2012.
157. Thouron L., Seigneur C., Kim Y., Legorgeu C., Roustan Y., Bruge B. Simulation of trace metals and PAH atmospheric pollution over Greater Paris: Concentrations and deposition on urban surfaces // *Atmospheric Environment*. 2017. (167). C. 360–376.
158. Tkachenko E. V., Debolskiy A. V., Mortikov E. V., Glazunov A. V. Large-Eddy Simulation and Parameterization of Decaying Turbulence in the Evening Transition of the Atmospheric Boundary Layer // *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics*. 2022. № 3 (58). C. 219–236.

159. Tominaga Y., Stathopoulos T. CFD simulation of near-field pollutant dispersion in the urban environment: A review of current modeling techniques // *Atmospheric Environment*. 2013. (79). C. 716-730.
160. Vardoulakis S., Fisher B. E. A., Pericleous K., Gonzalez-Flesca N. Modelling air quality in street canyons: a review // *Atmospheric Environment*. 2003. № 2 (37). C. 155-182.
161. Varentsov A., Mortikov E., Stepanenko V., Glazunov A. An Overlooked Sink: Quantifying the Impact of Aerosol Deposition on Building Walls with Large Eddy Simulation // *Atmosphere*. 2026. № 3 (17). C. 293.
162. Varentsov A. I., Mortikov E. V., Glazunov A. V., Debolskiy A. V., Kuzmicheva M. A., Stepanenko V. M. Large-Eddy Simulation Of Aerosol Transport Over Different Urban Local Climate Zones // *Geography, Environment, Sustainability*. 2025. № 3 (18). C. 68–79.
163. Varentsov A. I., Stepanenko V. M., Konstantinov P. I. High-resolution simulation of particle transport in the urban atmospheric boundary layer // *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2019. № 1 (386). C. 012045.
164. Varentsov M., Samsonov T., Demuzere M. Impact of Urban Canopy Parameters on a Megacity's Modelled Thermal Environment // *Atmosphere*. 2020. № 12 (11). C. 1349.
165. Venkatraman Jagatha J., Schneider C., Sauter T. Parsimonious Random-Forest-Based Land-Use Regression Model Using Particulate Matter Sensors in Berlin, Germany // *Sensors*. 2024. (24). C. 4193.
166. Viecco M., Jorquera H., Sharma A., Bustamante W., Fernando H. J. S., Vera S. Green roofs and green walls layouts for improved urban air quality by mitigating particulate matter // *Building and Environment*. 2021. (204). C. 108120.
167. Viecco M., Vera S., Jorquera H., Bustamante W., Gironás J., Dobbs C., Leiva E. Potential of Particle Matter Dry Deposition on Green Roofs and Living Walls Vegetation for Mitigating Urban Atmospheric Pollution in Semiarid Climates // *Sustainability*. 2018. № 7 (10). C. 2431.
168. Wamser C., Lykossov V. N. On the Friction Velocity during Blowing Snow // *Contributions to Atmospheric Physics*. 1995. № 1 (68). C. 85–94.
169. Wang M., Lin C.-H., Chen Q. Determination of particle deposition in enclosed spaces by Detached Eddy Simulation with the Lagrangian method // *Atmospheric Environment*. 2011. № 30 (45). C. 5376–5384.
170. Wilson J. D., Sawford B. L. Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere // *Boundary-Layer Meteorology*. 1996. № 1 (78). C. 191–210.

171. Wiman B. L. B., Ågren G. I. Aerosol depletion and deposition in forests—A model analysis // *Atmospheric Environment* (1967). 1985. № 2 (19). С. 335–347.
172. World Health Organization – Burden of Disease From the Joint Effects of Household and Ambient Air Pollution for 2012 | Climate & Clean Air Coalition [Электронный ресурс]. URL: <https://www.ccacoalition.org/resources/world-health-organization-burden-disease-joint-effects-household-and-ambient-air> (дата обращения: 21.09.2025).
173. Wu W., Liu R., Tang Y. Study on Mapping and Identifying Risk Areas for Multiple Particulate Matter Pollution at the Block Scale Based on Local Climate Zones // *Atmosphere*. 2024. № 7 (15). С. 794.
174. Xing Y., Brimblecombe P. Role of vegetation in deposition and dispersion of air pollution in urban parks // *Atmospheric Environment*. 2019. (201). С. 73–83.
175. Xu F., Gao Z. Frontal area index: A review of calculation methods and application in the urban environment // *Building and Environment*. 2022. (224). С. 109588.
176. Xu J., Ding W., He R., Liu M., Wu Y., Chen H. Investigating the synergistic response of urban form to PM_{2.5} and O₃ pollution using the LCZ: A novel analytical framework // *Sustainable Cities and Society*. 2026.
177. Xue F., Li X. The impact of roadside trees on traffic released PM₁₀ in urban street canyon: Aerodynamic and deposition effects // *Sustainable Cities and Society*. 2017. (30). С. 195–204.
178. Yang H., Xiao Y., Leng Q., Chen W. Applicability of the local climate zone framework in PM_{2.5} concentration simulation: A case study of Nanchang City's main urban area // *Progress in Geography*. 2025.
179. Yang Q., Chen W., Jia S., Li C., Chen Y. Influence of Urban Landscape Patterns on PM_{2.5} Concentrations from the LCZ Perspective in Shanghai City // *Land*. 2026.
180. Zhang H., Ahmadi G. Aerosol particle transport and deposition in vertical and horizontal turbulent duct flows // *Journal of Fluid Mechanics*. 2000. (406). С. 55–80.
181. Zhang L., Gong S., Padro J., Barrie L. A size-segregated particle dry deposition scheme for an atmospheric aerosol module // *Atmospheric Environment*. 2001. № 3 (35). С. 549–560.
182. Zhang Y., Ye X., Wang S., He X., Dong L., Zhang N., Wang H., Wang Z., Ma Y., Wang L., Chi X., Ding A., Yao M., Li Y., Li Q., Zhang L., Xiao Y. Large-eddy simulation of traffic-related air pollution at a very high resolution in a mega-city: evaluation against mobile sensors and insights for influencing factors // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2021. № 4 (21). С. 2917–2929.

183. Zhang Z., Chen Q. Prediction of particle deposition onto indoor surfaces by CFD with a modified Lagrangian method // *Atmospheric Environment*. 2009.
184. Zhao W., Xuan L., Li W., Wang W., Wang X. Comprehensive Impact of Different Urban Form Indices on Land Surface Temperature and PM_{2.5} Pollution in Summer and Winter, Based on Urban Functional Zones // *Sustainability*. 2025.
185. Zhao Z., Shen L., Li L., Wang H., He B.-J. Local Climate Zone Classification Scheme Can Also Indicate Local-Scale Urban Ventilation Performance: An Evidence-Based Study // *Atmosphere*. 2020. № 8 (11). C. 776.
186. Zhou S., Wang Y., Jia W., Wang M., Wu Y., Qiao R., Wu Z. Automatic responsive-generation of 3D urban morphology coupled with local climate zones using generative adversarial network // *Building and Environment*. 2023. (245). C. 110855.
187. Zwozdziak A., Gini M. I., Samek L., Rogula-Kozłowska W., Sowka I., Eleftheriadis K. Implications of the aerosol size distribution modal structure of trace and major elements on human exposure, inhaled dose and relevance to the PM_{2.5} and PM₁₀ metrics in a European pollution hotspot urban area // *Journal of Aerosol Science*. 2017. (103). C. 38–52.