

Д.П. Зинин, Г.М. Тептин, О.Г. Хуторова

## Применение мезомасштабной модели WRF-CHEM для исследования вертикальной и горизонтальной структуры нижней атмосферы в Республике Татарстан

Казанский государственный университет

Поступила в редакцию 26.02.2007 г.

Представлены результаты исследования структуры пространственно-временных вариаций реальной нестационарной атмосферы. Рассмотрены результаты численного моделирования на высокопроизводительном вычислительном кластере трехмерных пространственных неоднородностей метеопараметров, ряда примесей и их динамика. Анализ производится для Восточно-Европейского региона с учетом реальных неоднородной подстилающей поверхности и нестационарных метеоусловий и с привлечением современной модели атмосферной химии и переноса примесей WRF-CHEM. Сравнение рассчитанных временных рядов с осредненными получасовыми данными экспериментальных ежеминутных измерений показало удовлетворительное соответствие. Исследованы локальные вертикальная и горизонтальная структуры полученных возмущений, в том числе для концентрации атмосферных примесей.

### Введение

В настоящее время методы исследования локальной структуры метеорологического режима пограничного слоя и загрязнения атмосферы включают в себя сочетание математического моделирования и эмпирико-статистического подхода. В связи с решением задач контроля окружающей среды интенсивно развиваются модели распространения примесей в атмосфере [1–3]. Для использования мезомасштабных моделей с целью прогноза полей метеопараметров и атмосферных примесей необходимы привязка к конкретной географической местности и выбор различных схем параметризации атмосферных процессов. Верификация выбранных параметров численной модели возможна при наличии регулярных наблюдений метеопараметров и концентрации атмосферных примесей.

Мы располагаем уникальными данными ежеминутного мониторинга метеопараметров и примесей на сети пространственно разнесенных станций в Восточно-Европейском регионе России (г. Азнакаево – станция с координатами  $54,85^{\circ}$  с.ш.,  $53,1^{\circ}$  в.д.; г. Альметьевск – сеть из 5 станций, разнесенных на расстояния от 1 до 6 км, с координатами центра  $54,9^{\circ}$  с.ш.,  $52,3^{\circ}$  в.д.; г. Зеленодольск – станция с координатами  $55,85^{\circ}$  с.ш.,  $48,5^{\circ}$  в.д.; г. Казань – станция с координатами  $55,8^{\circ}$  с.ш.,  $49,1^{\circ}$  в.д.; г. Миннибаево – 2 станции, разнесенные на расстояние 2,5 км по долготе, с координатами центра  $54,8^{\circ}$  с.ш.,  $52,2^{\circ}$  в.д.) с 1996 по 2006 г. включительно. Анализ этих данных выявляет сложность и нерегулярность реальных атмосферных процессов, приводящих к временными и пространственным вариациям большинства параметров, включая концентрации малых газовых примесей и аэрозоля [4, 5].

Для исследования особенностей этих вариаций, их формирования и распространения, выявления волновой и макротурбулентной составляющих, их анизотропной зависимости от особенностей рельефа является важным получение адекватной модели неоднородностей с возможностью исследования как горизонтальной, так и вертикальной картин возмущений в конкретной географической области и в условиях локального климата.

Наиболее адекватным и информативным исследованием подобных вариаций представляется получение мгновенной трехмерной картины нижней атмосферы и ее динамики напрямую из уравнений гидротермодинамики и реальных начальных и граничных условий, для чего приходится прибегать к сложным и вычислительно затратным численным моделям [6, 7].

Одной из мощных современных численных моделей, отвечающих указанным выше требованиям, является мезомасштабная модель исследования и предсказания погоды WRF (Weather Research Model), разработанная Национальным центром атмосферных исследований США [8, 9]. Модель находится в открытом доступе, поэтому в последнее время в России стали появляться исследования на ее основе [10], показывающие перспективность ее применения.

В данной статье описано проведенное нами исследование на базе модификации модели WRF, называемой WRF-CHEM [11], которая является специальным развитием модели WRF и предназначена для включения в численный расчет учета переноса атмосферных примесей (аэрозоли и газы) и их химической трансформации. На данный момент исследования атмосферы на основе WRF-CHEM в России отсутствуют, хотя модель дает более обширные возможности для изучения реальной загрязненной атмосферы и представляет большой интерес.

## Описание исследования

Нами были рассмотрены нестационарные мезомасштабные метеопроцессы, включая перенос загрязнений, в Восточно-Европейском регионе России ( $55,6^{\circ}$  с.ш.,  $51^{\circ}$  в.д., Татарстан), и проведено численное трехмерное моделирование динамики слоя атмосферы до высот около 20 км. Расчеты производились для областей горизонтальных размеров  $800 \times 600$  км,  $100 \times 100$  км,  $15 \times 15$  км. Моделируемый объем аппроксимировался дискретной сеткой соответственно  $80 \times 60$ ,  $100 \times 100$  и  $50 \times 50$  узлов в горизонтальной плоскости и имел 31 слой по вертикали.

Границные условия задавались с учетом конкретных локальных особенностей территории: реального высотного рельефа, типа подстилающей поверхности, особенностей тепло- и влагообмена подстилающей поверхности с нижним слоем атмосферы. Мы использовали карты реальной подстилающей поверхности высокого разрешения (шаг в  $30''$ ).

Моделирование состоит из численного интегрирования уравнений гидротермодинамики и переноса с параметризаций некоторых дополнительных значимых атмосферных процессов. В нашем исследовании интегрирование производилось на базе модели WRF-CHEM.

Модель WRF-CHEM, как и модель WRF, позволяет рассчитывать гидродинамику воздушных потоков на основе сжимаемых уравнений Навье–Стокса в негидростатическом приближении, представленных в криволинейных координатах [12]. Интегрирование производится методом явного разделения на гравитационную и акустическую волновые моды [13]. Модель рассчитана на применение в современных вычислительных системах высокой мощности, поддерживает возможности параллельных вычислений, реализует численное представление физики различных атмосферных процессов.

Оригинальная часть WRF-CHEM реализует численное интегрирование процессов переноса атмосферных примесей (аэрозоли и газы) и их химической трансформации по моделям RAD2 [14] и MADE [15], включающим, в частности, примеси  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}_3$ ,  $\text{CO}$  и др. (30 классов антропогенных выбросов). Учитывается оседание примесей на подстилающую поверхность [16]. Используется параметризация биогенных источников по карте землепользования с помощью модели Гантера [17]. Модель позволяет проводить расчеты для произвольной пространственной системы источников (в том числе поднятых над поверхностью) выбросов с учетом зависимости их мощности от времени (с шагом 1 ч).

В качестве начальных и граничных метеорологических данных использовались результаты конечного анализа трехмерного глобального моделирования на модели EMC [18]. Результаты [19] конечного анализа за последний год доступны на сайте UCAR/NCAR. Данные представлены с разрешением  $1^{\circ}$  и интервалом 6 ч. Для задания начальной фоновой концентрации различных примесей используются идеализированные профили.

Для учета особенностей отдельных атмосферных процессов нами был опробован обширный набор численных схем и проведены расчеты для всех сезонов года с различными численными схемами. Анализ результатов расчетов и эксперимента показал, что из всех возможных численных схем [20] наиболее оптимальными для наших условий являются схемы, использующие: модель микрофизики Лина и др. (Lin et al. scheme), параметризацию эффекта кучевых облаков и конвекции методом Кейна–Фритца (Kain–Fritsch parametrization), модель земной поверхности Ноаха (Noah Land Surface Model), модель пограничного атмосферного слоя YSU (Yonsei University), модель длинноволнового излучения RRTM (Rapid Radiative Transfer), модель коротковолнового излучения Дудхии (Dudhia scheme). Эффекты поверхности слоя рассчитывались на основе теории подобия Монина–Обухова.

В результате расчетов получена динамика неоднородной структуры трехмерных полей скорости ветра, температуры, влажности (включая фазовые состояния), концентрации примесей. Такие результаты предоставляют широкие возможности для подробного пространственно-временного исследования нижней атмосферы.

Расчеты производились в распределенном режиме на вычислительном кластере физфака КГУ.

## Результаты моделирования и сравнение с экспериментальными данными

На рис. 1 приведены результаты моделирования и эксперимента только для лета 2005 г.

Среднеквадратические отклонения результатов модели от эксперимента (по экспериментальным рядам с шагом 30 мин) для различных сезонов приведены в таблице.

Параметр	Лето	Зима	Весна	Осень
Температура, $^{\circ}\text{C}$	1,775	3,592	2,678	1,472
Относительная влажность, %	9,794	11,17	30,79	9,36
Направление ветра, град	37,41	18,8	49,32	23,87

Результаты сравнения, представленные на рис. 1, показывают хорошее соответствие результатам эксперимента. В особенности это касается крупномасштабных временных изменений (от 4–6 ч и выше). На графиках влажности (здесь не приведен) и температуры ярко выражен суточный ход, на него накладываются нерегулярные возмущения. Хорошее соответствие модели и эксперимента наблюдается на графиках направления ветра, в особенности в периоды спокойного и достаточно медленного изменения направления ветра в зависимости от времени. В конце приведенного периода отмечается резкое изменение направления ветра. В таких метеорологически сложных условиях предсказания модели менее точны. Обобщенные по массиву расчетов и сезонам результаты сравнения, представленные в таблице, показывают на удовлетворительное соответствие модели эксперименту.

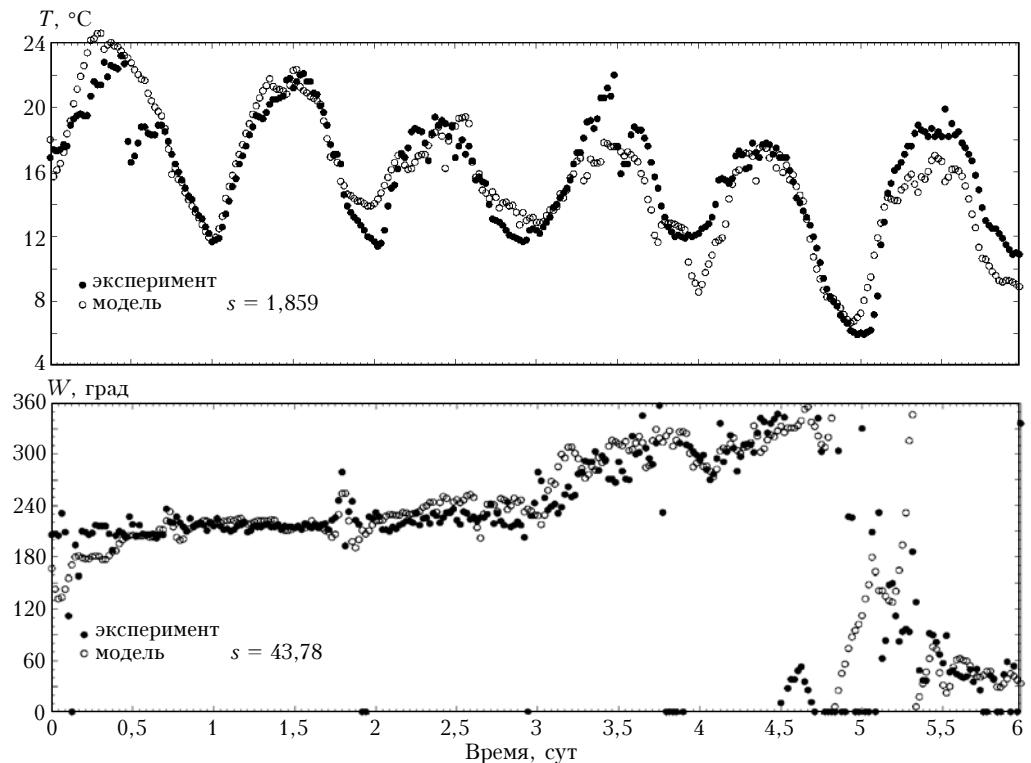


Рис. 1. Сравнение результатов моделирования и эксперимента для температуры воздуха и направления ветра на станции Азнакаево. Отсчет времени от 1 июля 2005 г. 03:00, с шагом 30 мин;  $s$  – среднеквадратическая разность рядов

Расхождения в поведении временных рядов на масштабах менее 4–6 ч могут быть связаны как с недостаточной адекватностью численных схем отдельных физических процессов, так и с недостаточной степенью пространственного разрешения модели, что приводит к невозможности полного разрешения тонких и мелкомасштабных физических процессов. Вопрос нуждается в дополнительном исследовании, в частности в расчете модели на кластере с большими вычислительными мощностями и при большем пространственном разрешении.

## Прогноз локальной неоднородной структуры атмосферных примесей

Нами проведено моделирование пространственных полей малых газовых примесей и массовой концентрации аэрозоля. На рис. 2 приведены результаты моделирования распространения газовой примеси  $\text{SO}_2$  от одного источника выбросов постоянной мощности после начала выброса на территории 100×100 км с центром в г. Альметьевске (54,9° с.ш.,

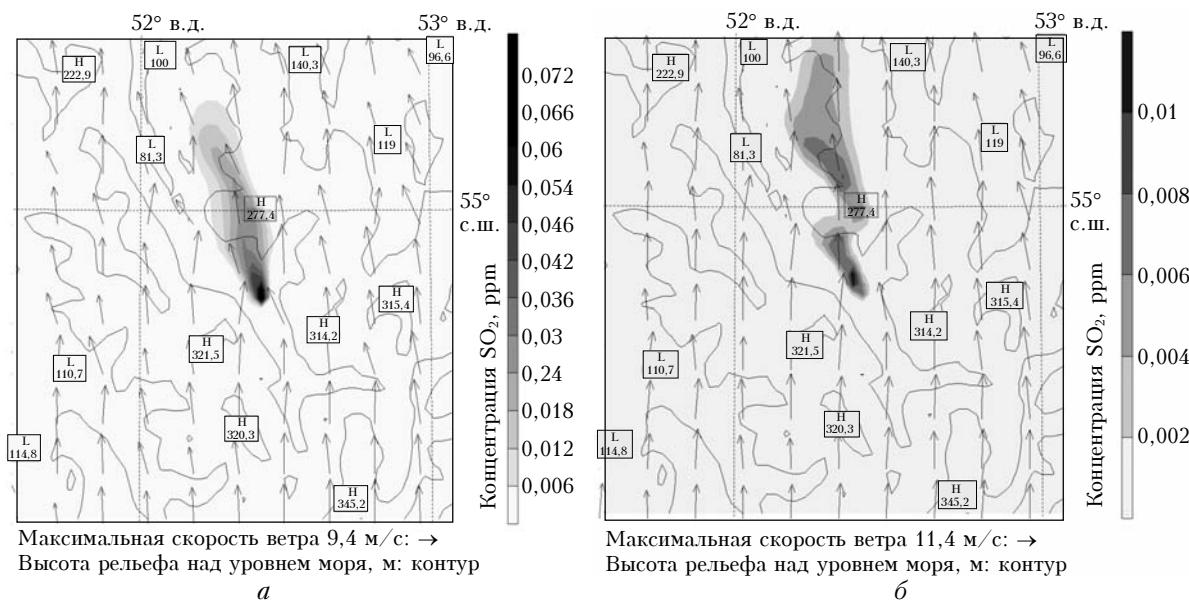


Рис. 2. Концентрация  $\text{SO}_2$  на высоте 30 (а) и 70 м (б) через 120 мин от начала выбросов

52,3° в.д.). Показаны рельеф местности, поле скорости ветра, уровень концентрации примеси.

Моделировался источник выброса постоянной мощности 550 кг/ч, соответствующий реальному местному предприятию, его доля выбросов  $\text{SO}_2$  среди всех промышленных предприятий города составила около 99%. На приведенном горизонтальном срезе ясно прослеживается распространение примеси под воздействием течения воздуха. С удалением от источника концентрация примеси падает.

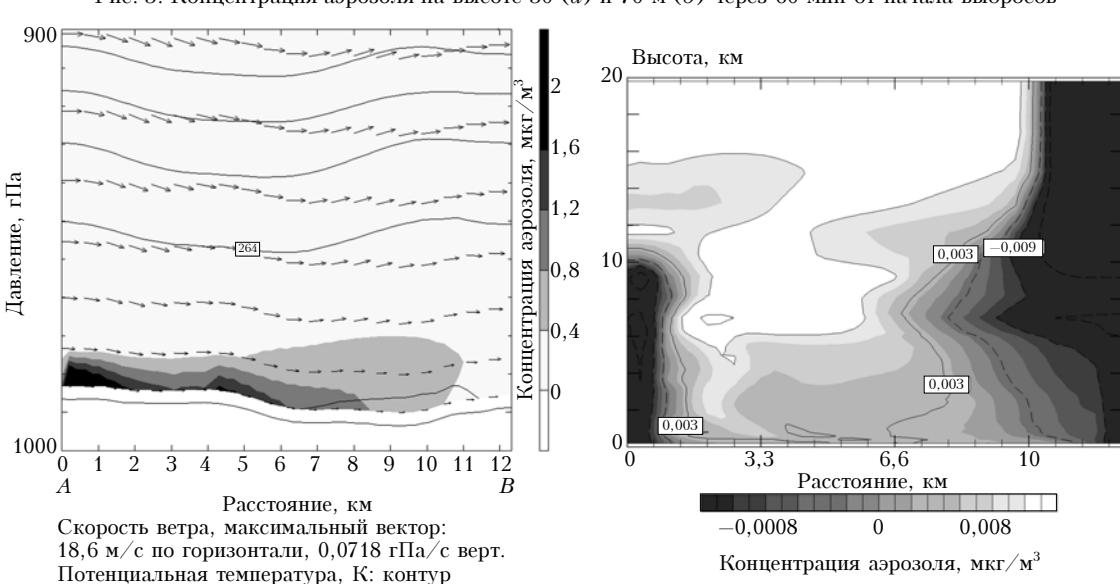
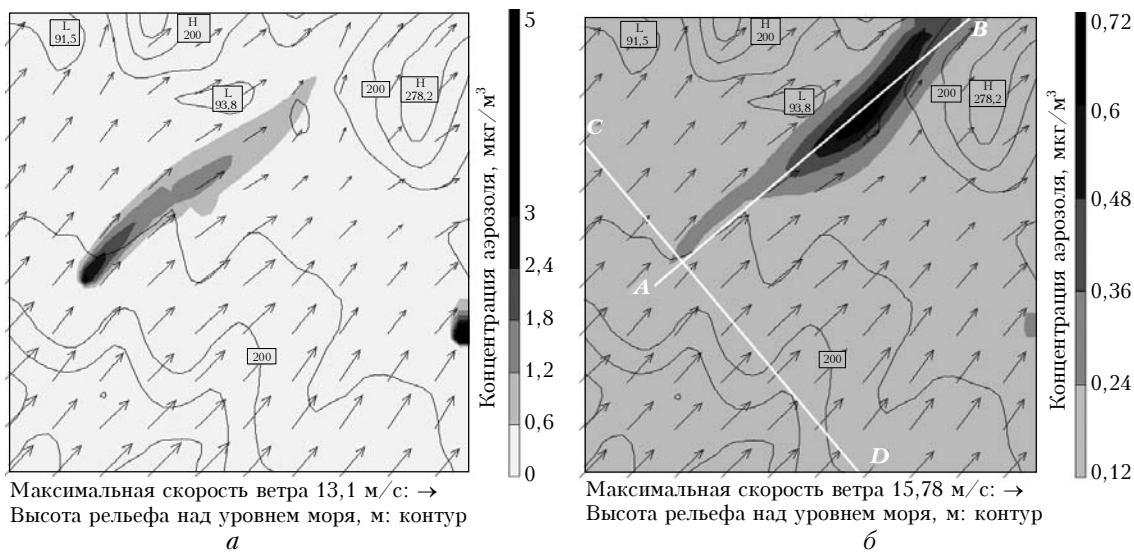
Важным результатом исследования является формирование неоднородной структуры поля концентрации примеси, изменение с высотой не только средней концентрации примеси, но и ее пространственной структуры. Образуется квазипериодическая неоднородная структура концентрации примеси, наиболее выраженная в области высоких концентраций. Продольный горизонтальный масштаб неоднородности – 15–25 км, поперечный горизонтальный – 4–8 км, вер-

тикальный – 100–200 м (значительно меньше горизонтального).

Полученные результаты соответствуют экспериментальным пространственным масштабам неоднородностей концентрации малых газовых примесей, полученным сетью станций атмосферного мониторинга в г. Альметьевске [4].

Для моделирования распространения аэрозоля от нескольких источников в малом промышленном городе мы рассмотрели область размером 15×15 км вокруг г. Альметьевска, что позволило провести моделирование с шагом горизонтальной дискретизации всего 300 м и различить сеть выбросов от нескольких более мелких городских предприятий. Перепад высот в данной локальной области составлял около 250 м.

На приведенных горизонтальном и вертикальном срезах (рис. 3, 4) можно проследить распространение суммарного аэрозоля со временем.



Из 22 заданных источников постоянной во времени мощности (мощность самого выраженного составляет 61 кг/ч) заметно проявили себя три. Один из них находится на самом краю области, и его выбросы в исследуемый период времени выносятся за ее пределы.

На горизонтальных срезах разных высот для одного момента времени (см. рис. 3) видно, что происходит распространение аэрозоля на высоту до 70–120 м, где концентрация падает примерно в  $e$  раз по сравнению с приземной областью. Виден изгиб следа выбросов из-за неоднородности поля скорости ветра, сформированной влиянием рельефа.

Рис. 4 представляет вертикальный срез вдоль следа выброса и перпендикулярный ему срез, который обнаруживает сложную вертикальную структуру возмущения фоновой концентрации аэрозоля. На продольном срезе различаются два источника выбросов, видна высотная структура абсолютной концентрации аэрозоля. Как и следовало ожидать в приземном слое, с удалением от поверхности земли скорость распространения примесей растет и достигает максимума, как показывает численный прогноз для нашего случая, на высоте 70 м. При сравнении со срезами в иные моменты времени (здесь не приведены) видно, что неоднородности скорости ветра когерентны в пространстве, заметно их перемещение со временем.

## Заключение

На основе модели WRF-CHEM для расчета сложной динамики реальной атмосферы и процессов переноса примесей над территорией Восточно-Европейского региона России создана численная модель с учетом локальных географических особенностей: используются карты реального рельефа, категорий землепользования высокого разрешения, выбраны оптимальные численные схемы атмосферных процессов.

Модель позволяет получать подробную трехмерную динамику полей метеопараметров, концентраций примесей. На основе созданной модели впервые проведено численное моделирование для исследуемой географической области. Результаты показывают сложную вертикальную и горизонтальную структуру образующихся неоднородностей в поле концентрации примесей.

Образуется квазипериодическая неоднородная структура поля скорости ветра, концентрации примеси. Продольный горизонтальный масштаб неоднородности равен 15–25 км, поперечный – 4–8 км, вертикальный – 100–200 м (значительно меньше горизонтального). Обнаружено перемещение неоднородностей со временем. Эти результаты соответствуют экспериментально полученным ранее результатам о мезомасштабных атмосферных неоднородностях концентрации малых газовых примесей по наблюдениям сети станций атмосферного мониторинга в г. Альметьевске. Модель так же, как и экспериментальные результаты, подтверждает орографическую природу локальных атмосферных неоднородностей метеопараметров и приземных примесей даже в условиях квазиравнинного рельефа.

Применение мезомасштабной модели WRF-CHEM для исследования вертикальной и горизонтальной структуры... 73  
10. Оптика атмосферы и океана, № 1.

Модель показала хорошее согласие с экспериментальными данными и может быть использована для широкого круга научных и практических задач, в прогнозе переноса и распространения загрязнений. По сравнению с экспериментальными результатами можно получить не только тонкую горизонтальную, но и вертикальную структуру нижнего слоя атмосферы, в том числе и концентрации примесей.

Работа частично поддержана грантом РФФИ № 04-05-64194 и госконтрактами Академии наук РТ № 06-6.3-13 и 09-9.5-32.

1. Берлянд М.Е. О закономерностях распространения атмосферных примесей и их учете при моделировании загрязнения // Инф. бюл. «Вопросы охраны атмосферы от загрязнения». НПК «Атмосфера» при ГГО им. А.И. Войкова. СПб., 2002. № 2(26). С. 5–12.
2. Алоян А.Е., Пененко В.В., Козодоров В.В. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды // Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования. Т. 2. Матмоделирование. М.: Наука, 2005. С. 279–351.
3. Алоян А.Е., Арутюнян В.О. Математическое моделирование изменчивости газового и аэрозольного состава атмосферы в региональном масштабе // Геогр. и природ. ресурсы. 2005. Спец. выпуск. С. 125–131.
4. Хуторова О.Г., Тептин Г.М. О природе мезомасштабных вариаций концентрации приземных атмосферных примесей // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 18. № 5–6. С. 425–429.
5. Хуторова О.Г., Тептин Г.М. Временные вариации аэрозоля и малых газовых примесей в приземном городском воздухе // Изв РАН. Физ. атмосф. и океана. 2003. Т. 39. № 6. С. 782–790.
6. Holton J.R. An introduction to dynamic meteorology. 3d ed. Academic Press, 1992. 511 p.
7. Марчук Г.И. Численное решение задач динамики атмосферы и океана. Л.: Гидрометеоиздат, 1984. 752 с.
8. Сайт поддержки и документации по модели WRF (англ.): <http://wrf-model.org>
9. Сайт поддержки и документации по модельному ядру ARW-WRF (англ.): <http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/>
10. Старченко А.В., Беликов Д.А., Вражнов Д.А., Есаулов А.О. Применение мезомасштабных моделей MM5 и WRF к исследованию атмосферных процессов // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 18. № 5–6. С. 455–461.
11. Сайт рабочей группы по атмосферной химии и документации по модели WRF-CHEM (англ.): <http://ruc.fsl.noaa.gov/wrf/WG11/>
12. Klemp J.B., Skamarock W.C., Dudhia J. Conservative Split-Explicit Time Integration Methods for the Compressible Nonhydrostatic Equations. 2000. Internet resource: [http://www.mmm.ucar.edu/individual/skamarock/wrf\\_equations\\_eulerian.pdf](http://www.mmm.ucar.edu/individual/skamarock/wrf_equations_eulerian.pdf)
13. Wicker L.J., Skamarock W.C. Time Splitting Methods for Elastic Models Using Forward Time Schemes. MWR. August 2002. Internet resource: [http://www.mmm.ucar.edu/individual/skamarock/rk3\\_mwr\\_2002.pdf](http://www.mmm.ucar.edu/individual/skamarock/rk3_mwr_2002.pdf)
14. Stockwell W.R., Middleton P., Chang J.S., Tang X. The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling // J. Geophys. Res. D. 1990. V. 95. N 10. P. 16343–16367.
15. Ackermann I.J., Hass H., Memmesheimer M., Ebel A., Binkowski F.S., Shankar U. Modal aerosol dynamics model for Europe: Development and first applications // Atmos. Environ. 1998. V. 32. N 17. P. 2981–2999.

16. Erisman J.W., van Pul A., Wyers P. Parameterization of surface resistance for the quantification of atmospheric deposition of acidifying pollutants and ozone // *Atmos. Environ.*. 1994. V. 28. N 16. P. 2595–2607.
17. Guenther A.B., Zimmerman P.R., Harley P.C., Monson R.K., Fall R. Isoprene and monoterpene emission rate variability: model evaluations and sensitivity analyses // *J. Geophys. Res. D*. 1993. V 98. N 7. P. 12609–12617.
18. Сайт поддержки и документации по глобальной модели EMC (англ.): <http://www.emc.ncep.noaa.gov/modelinfo/index.html>
19. NCEP Global Tropospheric Analyses datasets. Internet resource: <http://dss.ucar.edu/datasets/ds083.2/>
20. Документация по параметризации физических процессов в модели WRF (WRF PHYSICS). Интернет ресурс: <http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/wrf-phy.html>.

**D.P. Zinin, G.M. Teptin, O.G. Khytorova. Application of the mesoscale model WRF-CHEM for studying vertical and horizontal structure of low atmosphere in the Tatarstan.**

Results of research of spatio-temporal structure of nonstationary atmospheric variations are presented. Outcomes of numerical modeling of dynamics of three-dimensional space inhomogeneities of meteoparameters and some impurities are considered. The analysis is made for East-European region in view of real underlying surface and nonstationary meteosituation, with involving WRF-CHEM, the modern model of atmospheric chemistry and impurities transfer. The comparison of the computed time series with experimental data has shown a good agreement. Local vertical and horizontal structure of the gained perturbations is explored, including the concentration of atmospheric impurities.