

В.И. Акселевич, А.В. Тертышников, И.И. Румянцев, Р.И. Филимонов

К вопросу о численном моделировании вертикального распределения озона

*Российский государственный гидрометеорологический университет,
Военный инженерный космический университет им. А.Ф. Можайского, г. Санкт-Петербург*

Поступила в редакцию 5.10.99 г.

Рассматривается один из вариантов численного моделирования вертикального распределения озона в интересах его прогноза и оценки чувствительности модели к изменению внешних условий. Обсуждаются вопросы разработки систем уравнений, наиболее адекватно описывающих физические процессы. Приводятся графики, иллюстрирующие результаты моделирования, и делаются выводы о допустимости использования для моделирования сухой стратифицированной атмосферы. Осуществляется оценка результатов моделирования.

Озон, несмотря на сравнительно малый удельный вес в газовом составе атмосферы (если весь озон вытянуть в виде одной пленки вокруг поверхности земного шара, то ее толщина составит всего от 1,5 до 6 мм, в то время как для кислорода – 1560 м, а для азота 6200 м [1]), оказывает весьма существенное влияние на жизнедеятельность и здоровье человека [2]. С одной стороны, озон играет роль так называемого щита в отношении ультрафиолетовой радиации в диапазоне длин волн, а с другой – его высокая концентрация вредна для дыхательных путей человека и способна приводить даже к летальному исходу [3]. Озон является сильнейшим окислителем и одним из наиболее опасных загрязнителей в нижнем слое атмосферы.

В связи с этим важно исследовать вертикальное распределение данного газа и осуществить моделирование этого распределения. К настоящему времени собраны достаточно емкие архивы измерений ВРО [4].

В литературе описано довольно много моделей ВРО, например: фундаментальная модель образования озона С. Чепмена [5], модели с использованием реакций колебательного и электронно-возбужденного состояний частиц, водородного [6] и азотного [7] циклов, модели, использующие гипотезу о «вертикальной адвекции озона» [6], двумерная среднесезонная фотохимическая модель [8] и т.д. Вместе с тем идеальной модели пока не создано. В связи с этим для исследования особенностей вертикального распределения озона рассмотрим модель сухой стратифицированной атмосферы. Это вполне правомерно в связи с малыми размерами горизонтальных градиентов параметров атмосферы по сравнению с величиной их вертикальных градиентов. Поэтому, пренебрегая локальными производными по горизонтали, можно записать основные уравнения модели в декартовой системе координат.

1. Уравнение движения, определяющее баланс ускорений:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + W \frac{\partial W}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} - g + \frac{\partial}{\partial z} k_z \frac{\partial W}{\partial z}, \quad (1)$$

где W – вертикальная составляющая скорости ветра; g – ускорение свободного падения, величина которого за-

висит от высоты; k_z – коэффициент турбулентной вязкости; t – время; ρ – плотность воздуха; P – атмосферное давление.

2. Уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho W}{\partial z} = 0. \quad (2)$$

3. Уравнение состояния:

$$P = \rho R T, \quad (3)$$

где R – удельная газовая постоянная сухого воздуха ($R = 287$ Дж/(кг·град)); T – температура воздуха в кельвинах.

4. Уравнение переноса тепла:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + W \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} k \left(\frac{\partial T}{\partial z} + g_a \right) - \gamma_a W + \frac{Lm}{c_p}, \quad (4)$$

где k – коэффициент турбулентной теплопроводности; γ_a – сухоадиабатический градиент; c_p – удельная теплоемкость сухого воздуха при постоянном давлении 1005 Дж/(кг·К); L – удельная теплота парообразования массы пара m . Будем считать, что $m = 0$.

5. Уравнение переноса озона:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + W \frac{\partial S}{\partial z} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \rho k_z \frac{\partial S}{\partial z} + Q, \quad (5)$$

где S – массовая доля озона в атмосфере; Q – приток озона.

Таким образом, система уравнений (1)–(5) состоит из пяти уравнений с пятью неизвестными: T , W , P , S , ρ . В связи с отсутствием априорного знания об источниках и стоках тепла, озона, водяного пара и движения при расчете прогностических профилей вышеуказанных переменных целесообразно проведение регулярного контроля прогнозируемых профилей для их согласования между собой. Для этого использовали уравнение сохранения энергии, которое в случае адиабатичности преобразуется в уравнение Бернулли:

$$(W^2/2) + c_p T + g z = \text{const}. \quad (6)$$

Поскольку уравнения (1)–(5) взаимообусловлены, то для их решения нужно использовать численные методы. При этом наблюдаются определенные трудности использования численных моделей, среди которых, например, эффекты нефизических осцилляций расчетных профилей в областях возрастания их градиентов, которые могут приводить к отрицательным значениям заведомо положительных величин. Для борьбы с такими эффектами приходится использовать специальные методы интегрирования уравнений.

Нами в соответствии с рекомендациями [9] осуществлено введение искусственной вязкости в численную схему. С учетом этого интегрирование системы уравнений (1)–(5) проводилось с использованием метода шагов по времени (15 мин) в диапазоне высот от 0 до 60 км. Решение искалось с использованием согласованной полуневяной двухшаговой двухуровневой схемы Мацуно (схема Эйлера с пересчетом) первого порядка точности по времени (Δt) и второго по пространству (Δr), т.е. $O[\Delta t, (\Delta r)^2]$:

$$f_q^{s+1, (*)} = f_q^s + F_q^s \Delta t,$$

$$f_q^{s+1} = f_q^s + F_q^{s+1, (*)} \Delta t, \quad (7)$$

где f_q – искомая функция; F – члены, не содержащие производных по времени; s – номер временного слоя; q – номер точки на пространственном шаблоне.

Как видно, схема (7) состоит из двух частей: схемы-предиктора (первая формула) и схемы-корректора (вторая). С помощью схемы-предиктора вычисляются предварительные значения, которые затем уточняются с помощью схемы-корректора. Основным критерием при выборе конечно-разностной схемы служило условие устойчивости при выполнении критерия Куранта–Фридрихса–Леви (КФЛ). В этом случае схема подавляет относительную амплитуду высокочастотных колебаний, является безусловно устойчивой и обладает свойством диссипативности.

Для увеличения счетной вязкости и подавления вычислительных мод в численную схему включались частотные фильтры и итерации, позволяющие ограничить возможные амплитуды прогностических значений моделируемых профилей. Контроль счетной погрешности проводился на каждом временном шаге, исходя из текущего и предшествовавшего профилей моделируемой функции. За основу при построении фильтров был взят временной фильтр, предложенный Робером и Асселином [9]:

$$f_{ij}^{s-1} = f_{ij}^s + 0,025(f_{ij}^{s-1} - 2f_{ij}^s + f_{ij}^{s+1})^{s+1}, \quad (8)$$

где $s = t/\Delta t$.

Для решения уравнения движения (1) пришлось дробить временные шаги, чтобы добиться реальных значений вертикальной скорости. С целью повышения устойчивости решения использовали предложение о квазистационарности по времени уравнения на каждом шаге с учетом изменения параметров, входящих в (1).

Алгоритм модели базируется на использовании метода последовательных приближений. На первом этапе происходило объявление переменных, массивов и задание констант, используемых в модели. Далее осуществлялось считывание исходных профилей температуры, плотности воздуха, ускорения свободного падения, коэффициента вертикального перемешивания и парциального давления атмосферного озона для заданных уровней. Начальный

профиль W задавался исходя из предположения о том, что $W=0$ по всей области интегрирования. После этого осуществлялось вычисление значений W , ρ , T , S по схеме-предиктору сначала для внутренней области, а затем для крайних точек. Вычисление проводилось с использованием метода последовательных приближений с невязкой $\varepsilon = 0,001$. После вычисления каждого параметра осуществлялось фильтрование коротковолновых шумов, а после расчетов T и ρ – их согласование с использованием уравнения (6). Далее аналогичные вычисления производились по схеме-корректору. В заключение происходили переименование профилей и переход к следующему шагу по времени.

В качестве исходных данных использовали результаты наблюдений и климатическую информацию для пункта Татено (Япония), имеющего координаты 36,0° с.ш., 140,1° в.д. К ним относятся значения плотности и температуры воздуха, ускорения свободного падения в стандартной атмосфере [10], температуры и плотности воздуха в справочной атмосфере [2], коэффициента вертикального перемешивания в соответствии с [11] и парциального давления озона [2].

Для примера использовались несколько профилей ВРО, полученных для станции Татено в январе 1981 г. и приведенных в [4]. На рис. 1 представлены реальные профили ВРО для Татено, пересчитанные на 2-километровый шаг по высоте с помощью линейной интерполяции и экстраполяции, а также многолетний «климатический» профиль ВРО для данных широт согласно [2].

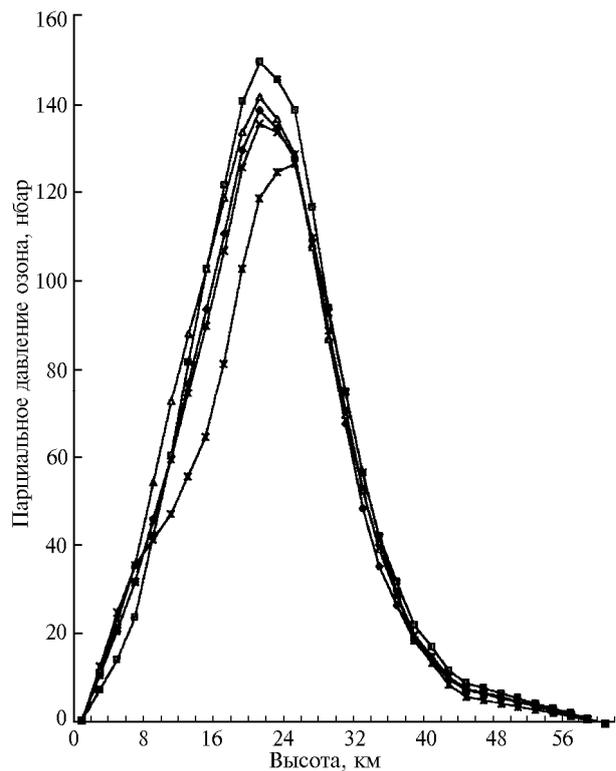


Рис. 1. Фактические профили ВРО над Татено 15–18.01.1981 г., проэкстраполированные по данным озонзондирования на 2-километровую сетку, и средний климатический профиль. —♦— 15.01.81; —■— 16.01.81; —▲— 17.01.81; —○— 18.01.81; — — — средний климатический профиль

Величина шага интегрирования по времени выбиралась с учетом выполнения условий устойчивости, сходи-

мости и межузлового шага по высоте, равного 2 км, и составляла 15 мин. Профили коэффициентов вертикального перемешивания задавались согласно [12].

В ходе численного эксперимента исследовались изменения вида профиля через 3 сут после запуска модели при различных сочетаниях вышеперечисленных начальных условий, а также при нагреве у Земли, в слое 30–40 км, при изменении скорости вертикальных движений воздуха.

На рис. 2 представлены результаты моделирования ВРО с использованием климатического профиля озона и в условиях стандартной и справочной атмосфер после расчета на 3 сут. Анализ показывает, что обе модели, в целом, адекватно описывают профиль озона. Вместе с тем следует отметить тенденцию к аномальному распределению озона в слое 6–10 км и достаточно большие отклонения на уровне 2 км и в слое выше 30 км. Их максимум достигает 40% от значения рассматриваемых величин парциального давления озона в нанобарах. В слое 9–23 км обе модели несколько занижают результат, а в слое над ним завывают. Вместе с тем на уровне максимального парциального давления, который составил 24 км, отклонение модельных значений от среднеклиматического составило примерно 3%.

Различие между собой профилями ВРО, построенных с использованием исходных данных для справочной и стандартной атмосфер, незначительно за исключением слоев 0–12 и 50–56 км, где максимум расхождения достигает в нижнем слое 19, а в верхнем – 10%. При этом на различных уровнях обе модели попеременно оказываются ближе к среднеклиматическому профилю. Все же предпочтительнее оказалось использовать данные справочной атмосферы [2], с помощью которых оптимальный результат достигается на 67% уровней.

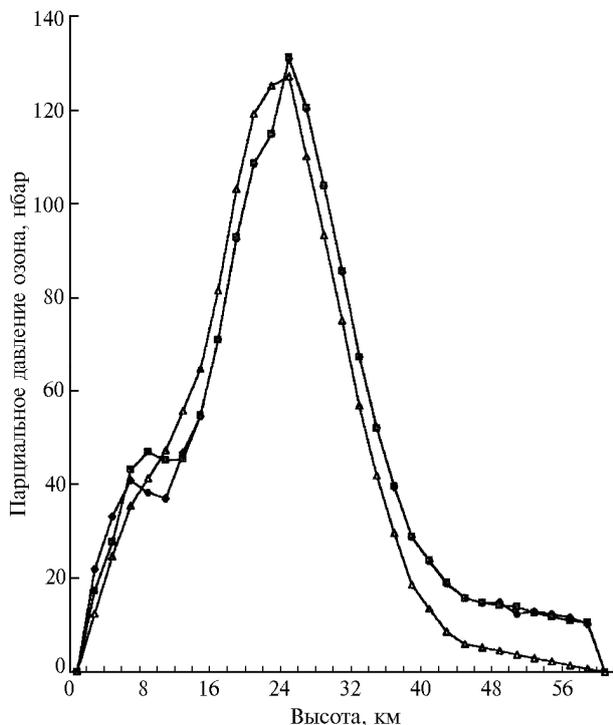


Рис. 2. Результаты моделирования ВРО через 3 сут по данным справочной и стандартной атмосфер, в сравнении со средним климатическим профилем. —♦— профиль, полученный через 3 сут по данным справочной атмосферы; —■— то же по данным стандартной атмосферы; —▲— среднеклиматический профиль

Сравнение реального профиля ВРО за 18.01.1981 г. (пересчитанного на вышеописанную сетку) с вычисленным по модели с использованием данных о реальном ВРО 15.01.1981 г. показало их почти полную идентичность (до высоты 30 км отклонение не превысило 4%). Уровень максимального содержания озона, как и в исходном профиле, остался на уровне 20 км, что на 4 км ниже среднего «климатического».

В интересах исследования чувствительности модели проводились численные эксперименты по внесению возмущений в температурный режим и увеличению скорости вертикальных движений воздуха.

На рис. 3 рядом со средним климатическим профилем и профилем, построенным на основе справочной атмосферы и среднего климатического профиля озона, представлен профиль ВРО, для расчета которого температура у Земли в исходных данных была увеличена на 5°, на уровне 2 км – на 0,5° и на уровне 4 км – на 0,1°. Через 3 сут значимые различия в виде смоделированных профилей проявились в слое 2–10 км и привели к уменьшению значений парциального давления озона на всех этих уровнях на величину до 20% от размера оцениваемых значений.

На рис. 4 отображены средний климатический профиль, профиль, построенный с использованием справочной атмосферы [2] и среднего климатического профиля озона, и профиль ВРО, при построении которого в исходных данных скорость вертикальных движений воздуха в течение 10 ч увеличивалась на 0,1 м/с. При этом было выявлено существенное уменьшение парциального давления озона (на величину до 62%) в слое 2–9 км.

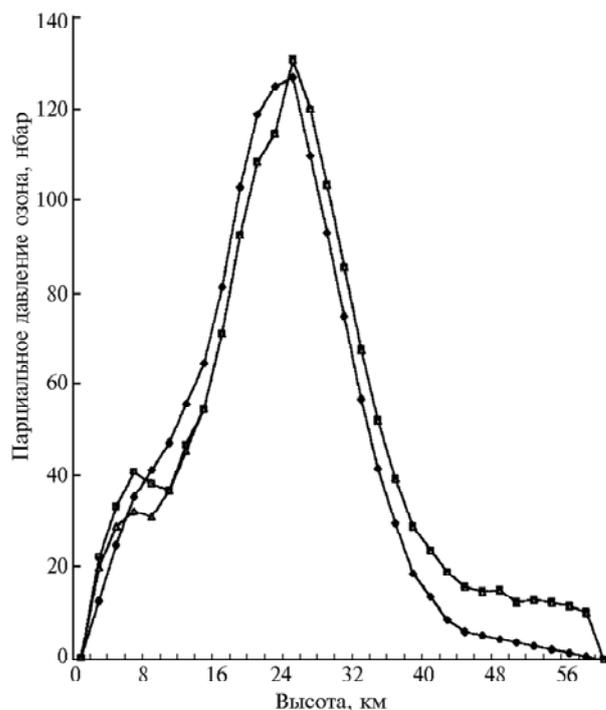


Рис. 3. Результаты моделирования ВРО через 3 сут по исходным данным справочной атмосферы и с учетом нагрева в нижнем слое в сравнении со средним климатическим профилем. —♦— среднеклиматический профиль; —■— профиль, полученный через 3 сут по данным справочной атмосферы; —▲— профиль, полученный после учета дополнительного нагрева

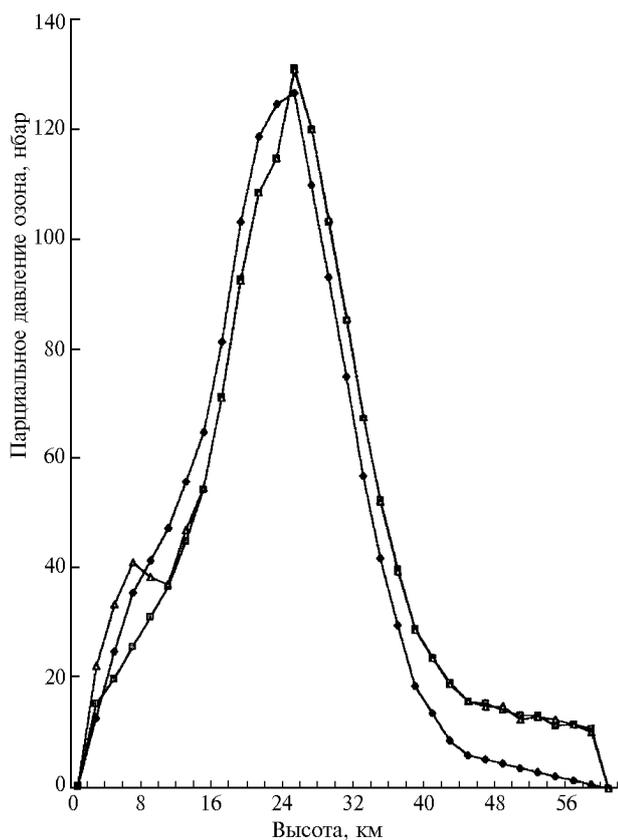


Рис. 4. Изменение вида профиля ВРО после расчета на 3 сут с учетом изменения скорости вертикальных движений. —♦— средний климатический профиль; —■— профиль, полученный с помощью изменения скорости вертикальных движений; —△— профиль, полученный с использованием данных справочной атмосферы

Таким образом, следует отметить, что примененная модель вполне адекватно отражает физику происходящих процессов. Анализ полученных результатов свидетельствует о незначительном влиянии изменения скорости вертикальных движений и температуры в нижней и средней тропосфере на концентрацию и парциальное давление озона и целесообразность приоритетного учета при моделировании реального профиля ВРО, используемого для прогноза. Для дальнейшего прояснения вопроса о прогнозировании ВРО на различные сроки требуется набрать статистически значимое число реализаций прогноза профилей ВРО.

1. *Синоптическая и авиационная метеорология. Ч. 2. Авиационная метеорология.* М.: Воениздат, 1985. 267 с.
2. *Атмосфера: Справочник (справочные данные, модели).* Л.: Гидрометеониздат, 1991. 512 с.
3. Liu S.C., McKeen S.A., and Madronich S. Effect of anthropogenic aerosols on biologically active ultraviolet radiation // *Geophys. Res. Lett.* 18. 1991. P. 2265.
4. *Ozone data for the world.* Toronto: Dep. Transport, 1962–1998.
5. Chapman S. // *Phil. Mag. Ser. 7.* 1930. V. 10. N 64. P. 369–385.
6. Хргиан А.Х., Кузнецов Г.И., Кондратьева А.В. Исследования атмосферного озона // *Метеорол. исследования.* М.: Наука, 1965. № 8. 90 с.
7. Crutzen P.J. // *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* 1970. V. 96. N 408. P. 320–325.
8. Смышляев С.П. Оптимизация алгоритма численного решения уравнений двухмерной среднесезональной фотохимической модели // *Атмосферный озон: Сб. научн. трудов (межвузовский).* Л.: ЛГМИ, 1991. Вып. 111. 128 с.
9. Белов П.Н., Борисенков Е.П., Панин Б.Д. Численные методы прогноза погоды. Л.: Гидрометеониздат, 1989. 376 с.
10. Мезингер Ф., Аракава А. Численные методы, используемые в атмосферных моделях. Л.: Гидрометеониздат, 1979. 136 с.
11. *Атмосфера стандартная.* ГОСТ 4401-81. М.: Изд-во стандартов, 1981. 180 с.
12. Johnston H., Kattenhorn D. Use of excess carbon 14 data to calibrate models of stratospheric ozone depletion by supersonic transports // *J. Geophys. Res.* 1976. V. 81. P. 368–380.

V.I. Akselevich, A.V. Tertyshnikov, I.I. Rumyantsev, R.I. Filimonov. About numerical simulation of the ozone vertical distribution.

A variant of the ozone vertical distribution model for its forecasting and an estimate of the model sensitivity to a change of external conditions are presented. The equation systems are discussed which describe the physical processes most adequately. Illustrations of the modeling results are given and the conclusions about the model applicability to simulating the dry stratified atmosphere are made. An estimate of the modeling results is realized.