# ИЗМЕРЕНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЩЕГО И ТРОПОСФЕРНОГО ОЗОНА

**А. А. Велесь[1], А. В. Шаврина[1], М. Г. Сосонкин[1], В. А. Дячук[2]**



[1] *Главная астрономическая обсерватория НАН Украины*
*ул. Академика Заболотного, 27, 03680 Киев, Украина*
*e-mail:* veles@mao.kiev.ua, shavrina@mao.kiev.ua, sosonkin@mao.kiev.ua

[2] *Институт гидрометеорологии (УкрНИГМИ), Киев, Украина*

Описывается методика и программное обеспечение для моделирования процессов формирования, стока и переноса тропосферного озона при реальных метеорологических и географических условиях. Детально рассматривается программный комплекс UAM-V, предназначенный для решения поставленной задачи. Приводятся результаты измерений общего содержания озона в атмосфере методом инфракрасной фурье-спектроскопии с использованием программы MODTRAN3, моделирующей перенос излучения в атмосфере.

TOTAL AND TROPOSPHERIC OZONE MEASUREMENT AND MODELING, by Veles A. A., Shavrina A. V., Sosonkin M. G., Dyachuk V. A. – The technique and software for modelling the formation, sinks and transport processes of tropospheric ozone in real meteorological conditions are described. The program UAM-V developed for solving these problems is considered in detail. The results of the total ozone measurements obtained by the infrared Fourier-spectroscopy method and simulated by the program for atmospheric transmission MODTRAN3 are discussed.

## ВВЕДЕНИЕ

Для анализа спектров поглощения земной атмосферы в ГАО НАНУ создается комплекс программ, позволяющий определять концентрации загрязняющих веществ в городском приземном слое и предсказывать их локальные значения в зависимости от объема выброса загрязнителей точечными и объемными источниками в городском домене, а также от метеорологических условий и интенсивности солнечного излучения.

Как главные цели данной работы можно выделить следующие моменты: **мониторинг** озона и сопутствующих газов и **прогноз** опасных озоновых эпизодов. Решение поставленной задачи можно разбить на несколько этапов:

– измерения;
– моделирование;
– сравнение модели с наблюдениями;
– предсказание эпизодов.

На сегодняшний день программный комплекс включает два типа программ.

I. Программы для определения концентраций загрязнителей в нижних слоях атмосферы.

1. FLUX – моделирует спектры поглощения на горизонтальной трассе для заданных концентраций загрязняющих веществ, решает т. н. прямую задачу (создана в Главной геофизической обсерватории, Россия).
2. FITFAST – решает обратную задачу, т. е. находит концентрации загрязнителей из наблюдаемого спектра автоматически, подбирая их путем моделирования (создана в ГАО НАНУ).
3. MODTRAN – рассчитывает потоки (спектры) излучения, прошедшего земную атмосферу с учетом ее стратификации (физических параметров и концентраций основных и загрязняющих газов), создана в Air Force Geophysical Laboratory (США).

II. Программы для моделирования распространения загрязнений в нижних слоях атмосферы (тропосферы).

1. UAM-V – “Модель городского ангара”, разработана в SAI – Международном центре применения систем для моделирования качества воздуха с учетом фотохимии. Подробное описание модели дается ниже.
2. PMM – “Прогностическая метеорологическая модель”, разработана тоже в SAI.

## ИЗМЕРЕНИЯ

***Измерения общего содержания озона фурье-спектрометром ГАО НАН Украины с помощью программы MODTRAN.*** Для определения общего содержания озона использовался программный комплекс MODTRAN, который разрабатывался и совершенствовался коллективом AGFL на протяжении 2–3 десятилетий. Программа MODTRAN3 была получена нами благодаря любезности д-ра Гэйл Андерсон. В настоящее время она широко применяется для интерпретации как наземных наблюдений спектров земной атмосферы, так и баллонных и спутниковых наблюдений (см. например [6]). Модель позволяет рассчитывать атмосферное пропускание и излучение для частот от 0 до 50 000 см$^{-1}$, используя сферическую геометрию, функции источника для Солнца и Луны, учитывая однократное и многократное рассеяние и атмосферные профили газов, аэрозолей, облаков, туманов и дождя. Для расчетов применяется двухпараметрическая (температура и давление) модель молекулярной полосы, которая использует большой массив предварительно накопленных данных, выведенных на основе параметров спектральных линий из базы данных HITRAN96 [3] для 13 молекул ($H_2O$, $CO_2$, $O_3$, CO, $CH_4$, $O_2$, NO, $SO_2$, $NO_2$, $NH_4$ и $HNO_3$), и, кроме того, использует сечения поглощения для тяжелых молекул – CFC (9 молекул) и $ClONO_2$, $HNO_4$, $CCl_4$ и $N_2O_5$). При расчетах применялась стандартная летняя модель атмосферы для средних широт с 36 слоями. При определении общего содержания вводилась параметризация вертикального профиля концентрации:

$$\omega_g = c_g \int_j n_{0j}(z) dz, \tag{1}$$

где $n_{0j}(z)$ – модельный вертикальный профиль концентрации, $\omega_g$ – общее содержание газа, $c_g$ – определяемый параметр.

Определение параметров производилось на основе минимизации средней квадратичной невязки, вызванной рассогласованием между измеренными и рассчитанными с помощью программы MODTRAN значениями сигнала [1]. Результаты определения общего содержания озона на основе измерений 17, 18 и 19 июля 2001 г. приведены на рис. 1.

Полученные результаты неплохо согласуются с данными как спутниковых измерений TOMS [2], так и с измерениями государственной сети мониторинга в Киеве на озонометре M124. Сводные усредненные за день данные приводятся в таблице. Качество совпадения реального и модельного спектров иллюстрирует рис. 1.

Сравнение измерений общего содержания озона в ГАО с данными других приборов

| Дата | 17.07.2001 | 18.07.2001 | 19.07.2001 |
|---|---|---|---|
| Прибор | Содержание озона, DU | | |
| TOMS | $308 \pm 7$ | $319 \pm 7$ | $316 \pm 7$ |
| M124 | $310 \pm 16$ | $319 \pm 15$ | $323 \pm 16$ |
| Спектрометр ГАО | $313 \pm 16$ | $322 \pm 17$ | $295 \pm 25$ |

***Измерения содержания приземного озона в Центральном ботаническом саду Киева.*** Мониторинг концентраций озона в приземном слое выполнялся в Центральном ботаническом саду НАНУ в Киеве [4]. На рис. 2 представлены почасовые измеренные концентрации $O_3$ в период с сентября 2000 г. по июль 2001 г. Очевидно почти постоянное превышение максимально допустимой среднесуточной концентрации (30 мкг/м$^3$ или $15 \cdot 10^{-9}$), действующей на Украине [7].

## ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА МОДЕЛИ UAM-V И ВХОДНЫХ ДАННЫХ

Так называемая “Модель городского ангара” (UAM) была разработана в SAI (System Application International) и поддерживается свыше 25 лет. Ее создание относится к первым попыткам фотохимического моделирования качества воздуха в начале 1970-х годов.

UAM-V представляет собой фотохимическую модель с трехмерной сеткой координат для расчета концентраций как инертных, так и химически активных загрязнителей, которая учитывает физические и химические процессы в атмосфере, влияющие на концентрации загрязнителей.

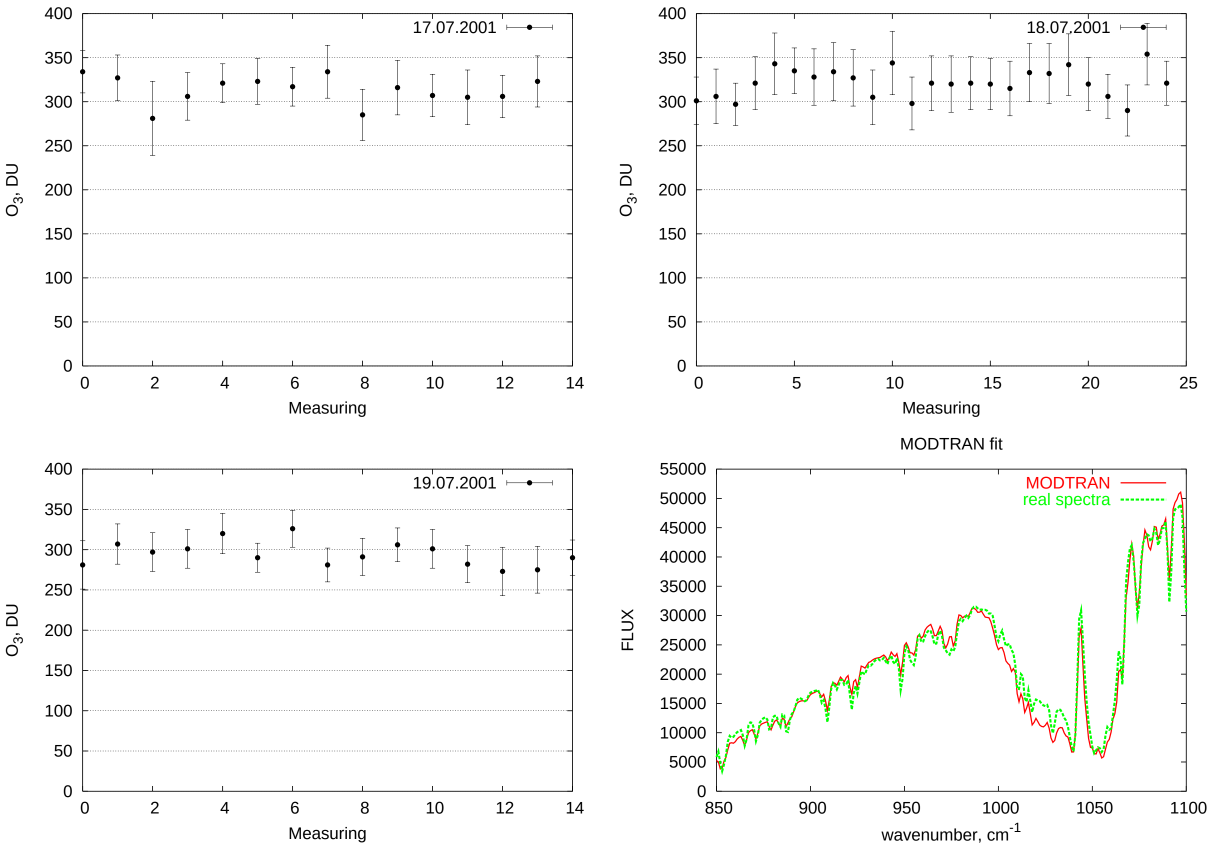


Рис. 1. Результаты определения общего содержания озона на основе измерений 17, 18 и 19 июля 2001 г.

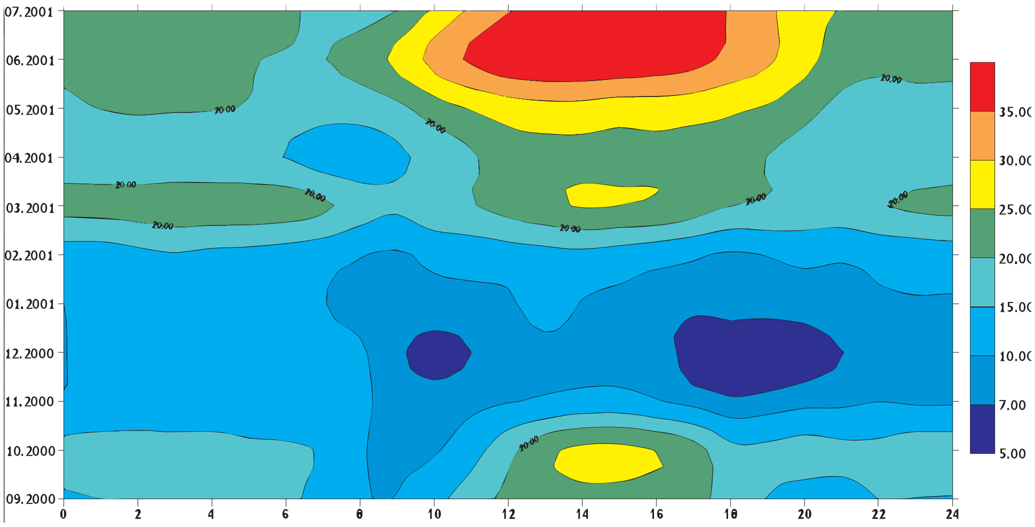


Рис. 2. Сезонный и суточный ход содержания озона в $10^{-9}$ (сентябрь 2000 – июль 2001 гг.)

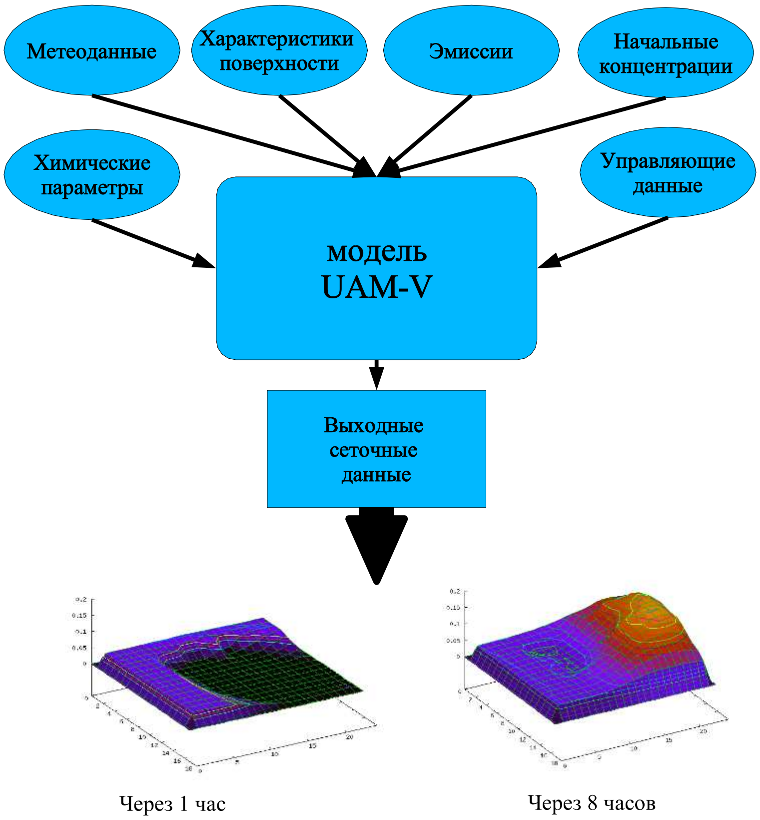


Рис. 3. Структура входных и выходных данных программы UAM-V.

Основу модели составляет математическое описание процессов диффузии и химических реакций с учетом эмиссий, сухого и влажного осаждения загрязняющих веществ. Для решения уравнений химической кинетики используется так называемый механизм углеродных связей, который позволяет разбить органические соединения на группы в зависимости от химических функциональных групп (парафины, олефины, кетоны и др.) и тем самым уменьшить на порядок количество рассматриваемых реакций. Так, используемый последней версией UAM механизм углеродных связей с включением токсических соединений CB-IV-TOX учитывает 100 реакций для более чем 30 химических соединений, в том числе реакции фотолиза для 7 соединений ($NO_2$, $O_3$, $HCHO_r$, $HCHO_s$, ацетальдегид, акролеин и группа альдегидов ALDX).

Модель UAM-V используется для расчетов концентраций озона, но может быть использована также для моделирования концентраций других малых газовых составляющих в атмосфере и для расчетов, которые не включают никаких химических реакций. В модели решается система уравнений непрерывности для соединений методом фракционных шагов, в котором вычисления производятся в следующем порядке:

1) с фиксированным временным шагом (обычно 3 часа) вводятся новые скорости эмиссий,

2) решаются уравнения горизонтальной адвекции/диффузии,

3) решаются уравнения вертикальной адвекции/диффузии и осаждения и уравнения для химически активных соединений,

4) выполняются расчеты химических преобразований.

Эта 4-ступенчатая процедура решения уравнений особенно удобна для оценки влияния эмиссионного сценария на качество городского воздуха. Обычно моделируют эпизоды повышенных концентраций озона, которые наблюдались (обычно 2–3 дня). Входные файлы для модели готовятся по наблюденным метеорологическим данным с учетом орографии выбранного домена,

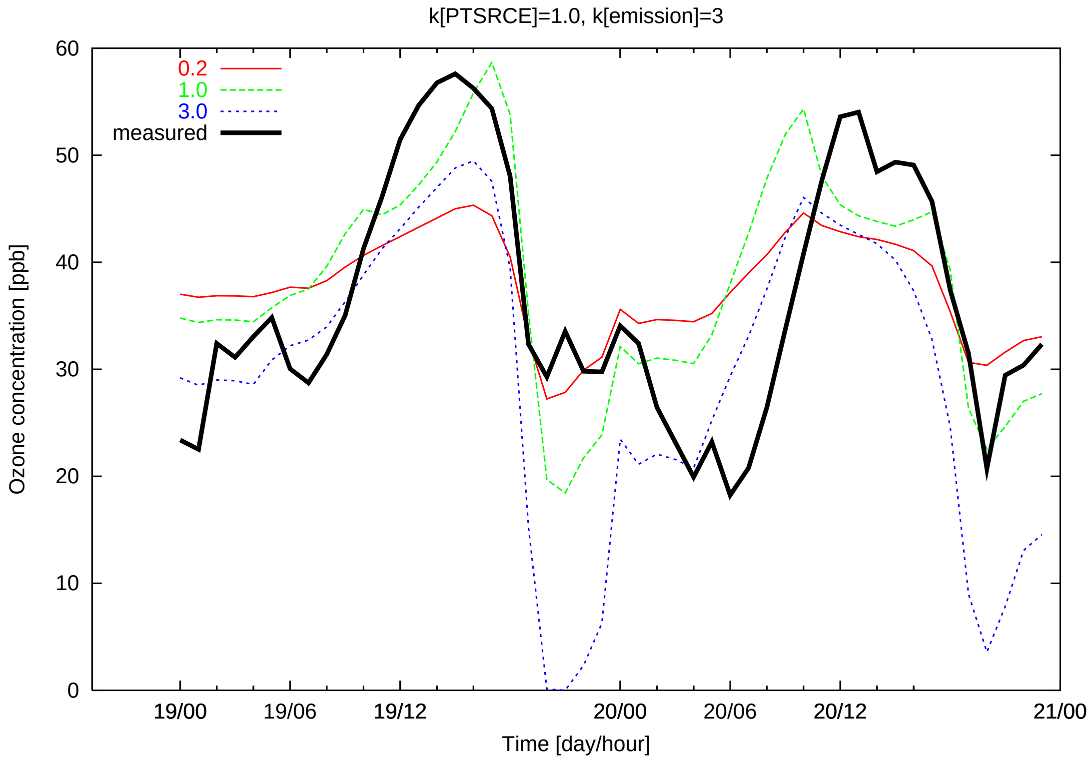


Рис. 4. Концентрации озона 19–20 августа 2000 г. по данным измерений (сплошная линия) и по результатам моделирования (прерывистые линии) со шкалированными эмиссиями $NO_x$ (в 0.2, 1.0 и 3.0 раза)

используя прогностическую метеорологическую модель, данным по эмиссиям и качеству воздуха (измерения Гидрометслужбы для Киева) для отдельного дня или группы дней. Схематическое представление структуры входных и выходных данных дается на рис. 3.

На рис. 4 жирной сплошной линией показаны результаты измерений хода концентрации озона в течение 19–20 августа 2000 г. Прерывистыми линиями показаны результаты моделирования концентрации озона для различных уровней эмиссий $NO_x$ (в 0.2, 1.0 и 3.0 раза).

Кроме оценки озоновых концентраций при текущих уровнях эмиссий, модель может использоваться также и для предсказания влияния на качество воздуха проектируемого снижения уровней эмиссий в будущем.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Работа выполняется в рамках Европейской программы EUREKA, проект EUROTRAC-2, подпроект SATURN, основной задачей которых является изучение распределения загрязнений атмосферы как в региональном масштабе, так и в масштабе крупного европейского города. Эта задача требует как разработки адекватных методов измерений концентраций загрязняющих веществ, так и усовершенствования модельных методов изучения диффузии загрязняющих веществ антропогенного и биогенного происхождения и образования вторичных загрязнителей. Физико-химические процессы формирования повышенных уровней тропосферного озона в сочетании с влиянием метеорологических условий в южных европейских городах стали предметом изучения нового подпроекта FOSEC.

Отрабатываемые в ГАО НАНУ методы измерения с помощью инфракрасного фурье-спектрометра, а также быстрой обработки наблюдений и мониторинга загрязнений атмосферы вместе с методами моделирования диффузии этих загрязнений для Киева представляются очень актуальными. Особый интерес представляет изучение режима формирования озона в разных районах Киева и его окрестностях, то есть является ли концентрация озона чувствительной к ограничению содержания в нижних слоях атмосферы окислов азота или летучих органических соединений. Эта задача важна как для прогнозирования эпизодов повышенных уровней приземного озона, который опасен для здоровья человека и вегетации растений и урожаев зерновых культур, так и для выработки политики регулирования концентраций озона путем ограничения выбросов $NO_x$ или летучих органических соединений.

Созданный в ГАО НАНУ комплекс программ позволяет решать поставленные задачи. Начаты эпизодические измерения инфракрасных спектров атмосферы с помощью фурье-спектрометра, которые планируется перевести в регулярный мониторинг в следующем году, ведется их обработка по программам FLUX, FITFAST и MODTRAN. Проводятся регулярные измерения концентрации приземного озона в Центральном ботаническом саду НАНУ с помощью ультрафиолетового озонометра. Выполняются модельные расчеты распространения загрязнений в конкретных условиях интенсивностей выбросов и метеорологических параметров, с использованием диффузионных моделей, и начаты расчеты для описания наблюдаемых озоновых эпизодов с учетом фотохимических процессов по программе UAM-V. Четырехмерное моделирование синоптической ситуации для использования выходных данных для расчетов с UAM-V проводится с помощью "Прогностической метеорологической модели" (PMM).


[1] *Goldman A., Fernald F. G., Murcrey F. J., et al.* Spectral least squares quantification of several atmospheric gases from high resolution infrared solar spectra obtained at South pole // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.–1983.–**29**, N 3.–P. 189–204.

[2] *McPeters R. D., Bhartia P. K., Krueger A. J., et al.* Earth Probe Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS) Data Products User's Guide // NASA Technical Publ. 1998-206895.

[3] *Rothman L. S., Rinsland C. P., Goldman A., et al.* The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric WorkStation): 1996 edition // J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.–1998.–**60**, N 5.–P. 665–710.

[4] *Sosonkin M. G., Shavrina A. V., Veles A. A., et al.* The study of surface ozone for Kiev city // Urban Air Quality: Proc. 4th Intern. Conf., Prague, Czech Republic, March 25–27, 2003.–P. 106–109.

[5] The MODTRAN 2/3 Report and LOWTRAN 7 MODEL / Eds L. W. Abreu, G. P. Anderson.–1996.

[6] *Wang J., Anderson G. P.* Validation of FASCOD3 and MODTRAN3: Comparison of Model Calculations with Interferometer Observations from SPECTRE and ITRA, in Passive Infrared Remote Sensing of Clouds and the Atmosphere II // Appl. Opt.–1996.–**35**.–P. 6028–6040.

[7] Руководство по контролю загрязнения атмосферы.–Л.: Гидрометиздат, 1979.–448 с.