

УДК 551.510.42

Сравнение результатов расчетов химико-транспортной модели WRF-CHEM с данными самолетных измерений в г. Норильске

П.Н. Антохин¹, А.В. Гочаков², А.Б. Колкер², А.В. Пененко^{3*}

¹Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1

²ФГБУ «Сибирский региональный научно-исследовательский гидрометеорологический институт»
630099, г. Новосибирск, ул. Советская, 30

³Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
630090, г. Новосибирск, ул. Академика Лаврентьева, 6

Поступила в редакцию 10.08.2017 г.

Проведена верификация результатов численного моделирования распространения антропогенных выбросов Норильской промышленной зоны с помощью модели WRF-CHEM с привлечением данных самолетного зондирования, выполненного в августе 2004 г. Показано, что выбранная конфигурация модели WRF-CHEM v3.5.1 адекватно воспроизводит метеорологические параметры, полученные в ходе измерительной кампании 2004 г. Результаты численного моделирования распределения концентраций сернистого ангидрида и озона и массовой концентрации аэрозоля качественно воспроизводят распределения, восстановленные из данных самолетного зондирования. Количественные оценки показали, что среднеквадратические ошибки для сернистого ангидрида, массовой концентрации аэрозоля PM_{2,5} и озона, рассчитанные для трех вылетов, составили 23 млрд⁻¹, 2,6 мкг/м³, 9,8 млрд⁻¹ соответственно. Такие расхождения могут быть вызваны некорректностью определения начальных и граничных условий, неточностями в задании величины антропогенных эмиссий, ограничениями в используемых аэрозольном и химическом механизмах.

Ключевые слова: самолетное зондирование, модель WRF-CHEM, Норильск, озон, антропогенное загрязнение; airborne sounding, WRF-CHEM model, Norilsk, ozone, anthropogenic pollution.

Введение

Норильская промышленная зона представляет собой одну из крупнейших промышленных площадок за полярным кругом. В качестве основного источника загрязнения атмосферы здесь выступает ГМК «Норильский никель». Суммарный годовой объем его антропогенных выбросов превышает 2 млн т [1]. Основную долю выбросов составляют оксиды азота (NO, NO₂), угарный газ (CO) и сернистый ангидрид (SO₂), который принадлежит к наиболее опасным загрязнителям и приводит к образованию серной кислоты и выпадению кислотных осадков [2]. Наблюдаемые признаки загрязнения: деградация растительности, закисление внутренних пресных водоемов, высокая кислотность почвы, обуславливают необходимость проведения исследований с целью определения степени опасности и оценки техногенного влияния антропогенных выбросов

Норильской промышленной зоны на окружающую среду региона.

В исследованиях [3, 4] для оценки степени загрязнения тяжелыми металлами территории вокруг Норильской промышленной зоны использовался подход, основанный на статистической обработке обратных траекторией движения воздушных масс, рассчитанных по модели HYSPLIT 4. В работе [5] была предпринята попытка численного моделирования распространения выбросов с помощью трехмерной модели конвекции–диффузии; авторы сделали ряд упрощений относительно метеорологических условий и химических преобразований. Химический блок модели включал две примеси (SO₂ и SO₄²⁻), учитывал переход диоксида серы в сульфаты и скорость вымывания их осадками. Позднее в [6] было показано хорошее соответствие результатов расчета модели [5] и данных наблюдений, сделанных в ходе экспедиционных исследований загрязнения снежного покрова Норильской промышленной зоны. В [7] восстанавливались величины выбросов SO₂ на основе данных дистанционного зондирования со спутника OMI; было показано, что разница между восстановленными значениями мощности выбросов SO₂

* Павел Николаевич Антохин (apn@iao.ru); Александр Владимирович Гочаков (gochakov@sibnigm.ru); Алексей Борисович Колкер (alexk@sibnigm.ru); Алексей Владимирович Пененко (a.penenko@yandex.ru).

и результатами наземных измерений может достигать 65%. Отметим работу [8] о приземном распределении SO_2 и тяжелых металлов, в которой для оценки и классификации состояния экосистем Норильской промышленной зоны применялся современный подход, основанный на ГИС-технологии. Эксперименты, направленные на изучение распространения шлейфов выбросов Норильской промышленной зоны в пограничном слое атмосферы и свободной тропосфере, описаны в [9–13].

Цель настоящей работы – проведение численного эксперимента по моделированию распространения шлейфа выбросов Норильской промышленной зоны с применением модели WRF-CHEM и верификация результатов на основе данных самолетного зондирования.

Описание модели

Из ряда региональных моделей, включающих расчет метеорологических условий: COSMO-ART (DWD), MM5-CMAQ (NCAR), WRF-CHEM, была выбрана мезомасштабная модель Weather Research and Forecasting model coupled with Chemistry (WRF-CHEM) v.3.5.1. [14], как наиболее подходящая для научных исследований [15–20].

Моделирование осуществлялось в прямоугольном домене в проекции Ламберта, ограниченном по горизонтали координатами 67,8–70,8° с.ш. и 84,1–92,1° в.д. и по высоте уровнем давления 50 гПа. Число узлов расчетной области составило $59 \times 69 \times 30$ по долготе, широте и высоте соответственно; шаг сетки по горизонтали – 5 км, по времени – 60 с, по высоте задавался ETA-координатой, учитывающей топографическую поверхность и возрастающей с высотой от нижнего уровня 65 м. Данные рельефа задавались с разрешением 30". Результаты моделирования сохранялись для каждого шага по времени. Вычислительный эксперимент проводился для периода с 30 июля по 14 августа 2004 г. Первые четыре расчетных дня, с 30 июля по 2 августа включительно, использовались для инициализации модели и не учитывались при исследовании. Самолетное зондирование в этот период выполнялось трижды: 3, 10 и 13 августа.

Начальные и граничные условия для полей метеорологических величин задавались на основе данных модели FNL (NCEP) [31] с 6-часовым разрешением по времени. Поля метеорологических данных FNL получены из данных GFS [32] и увеличенного объема данных наблюдений. Начальные и граничные условия для полей химических веществ принимались нулевыми.

При моделировании процессы микрофизики облаков описывались моделью, предложенной в работе [21]; перенос длинноволновой радиации – моделью [22], использующей 16 спектральных полос. Для параметризации коротковолновой радиации привлекался подход [23]. К приземному слою атмосферы была применена параметризация на основе теории подобия Монина–Обухова [24], к пограничному слою – на основе нелокального замыкания с учетом

контргradienta [25]. Описание распределения температуры почвы сделано в четырехслойной модели Noah LSM [26]. Параметризация облачной конвекции осуществлялась по схеме Grell 3-D [27].

В расчетах был использован химический механизм Regional Atmospheric Chemistry Mechanism (RACM) [28], в котором участвуют 77 веществ и 237 реакций, из них 27 – фотолитические. Динамика аэрозольных частиц моделировалась с помощью аэрозольного блока модели Goddard Chemistry Aerosol Radiation and Transport (GOCART) [29], встроенного в WRF-CHEM. Выбранный механизм позволяет рассчитать суммарную массовую концентрацию аэрозольных частиц диаметром до 2,5 и до 10 мкм, органического углерода и сажи. Химический и аэрозольный механизмы рассчитывались при помощи химического препроцессора (Kinetic PreProcessor, KPP) [30].

Источники антропогенных выбросов задавались в приземном слое с помощью базы EDGAR V.4.2 с пространственным разрешением $0,1^\circ \times 0,1^\circ$ и разрешением по времени один год. Использовались данные эмиссий за 2004 г. Мощность источников считалась постоянной; внутрисуточная и недельная динамика выбросов игнорировалась. Предполагалось, что ключевое воздействие на состояние окружающей среды в регионе исследований оказывают выбросы промышленных предприятий, поэтому прочие источники эмиссий (биогенные, лесные пожары) не учитывались. Для интерполяции данных к расчетному домену применялась утилита PREP_CHEM.

Методика сравнения данных

Для верификации результатов численного моделирования привлекались данные самолетного зондирования, выполненного в 2004 г. в промышленной зоне Норильска. Подробное описание технологии самолетных наблюдений и оборудования, установленного на борту самолета-лаборатории Ан-30 «Оптик-Э», приведены в [9–13, 33, 34]. В работе использовались данные измерений газоанализаторами Model 43 (SO_2) (Thermo Environmental Instruments), 3.02П-А (O_3) и К100 (CO) (ОПТЭК); счетчиком аэрозольных частиц АЗ-5 (Приборный завод, г. Выborg).

Данные самолетных измерений представляют собой временные ряды измеряемых параметров с периодом регистрации 1 с, а результаты численного моделирования – значения параметров, вычисленные в узлах фиксированной сетки. Для проведения сравнения данные зондирования предварительно усреднялись по времени с интервалом 60 с (поскольку скорость самолета при горизонтальном полете составляла ~300–330 км/ч, то за 1 мин полета он преодолевал расстояние ~5 км). Такое усреднение позволило согласовать пространственное и временное разрешения данных самолетного зондирования и результатов численного моделирования.

При расчете статистик, используемых в нашей работе, из результатов моделирования формировал

ся ряд исследуемой величины следующим образом: для каждой точки из усредненного ряда данных измерений, используя пространственные и временную координаты, подбиралась ближайшая в горизонтальной плоскости и по времени точка из результатов моделирования. Если точка находилась между соседними высотными уровнями модели, то для получения значения на заданной высоте использовалась линейная интерполяция. Этот подход применялся для построения временных разверток.

Площадные разрезы строились для данных измерений, выполненных в режиме горизонтального полета: определялся час проведения измерений, и за этот час выбирались результаты численного моделирования. Если высота зондирования располагалась между соседними высотными уровнями модели, то для получения необходимых значений применялась линейная интерполяция. Площадные разрезы строились отдельно для каждого часа полета.

Для удобства сравнения результатов численного моделирования с данными самолетного зондирования на рисунках используется одна цветовая шкала.

Концентрации газовых составляющих, измеренных с борта самолета, были переведены из массовых концентраций ($\text{мкг}/\text{м}^3$) в объемные доли (млрд^{-1}). Счетная концентрация аэрозольных частиц с диаметром до 2,5 $\mu\text{м}$ была переведена в массовую концентрацию и просуммирована для получения параметра $\text{PM}_{2,5}$.

Сопоставление результатов моделирования и данных самолетного зондирования

Результаты моделирования метеорологических полей (сплошная заливка) приведены на рис. 1 (цветная вкладка) в сравнении с данными самолетного зондирования (кружки) 10 августа 2004 г.

Сопоставление основных метеорологических параметров, полученных в ходе самолетного зондирования и в результате численного моделирования для высоты (500 ± 10) м, показало, что расчетные значения температуры воздуха (рис. 1, а) занижены относительно данных наблюдений на 1–3 °С, а относительной влажности (рис. 1, б) — завышены на 15–20%.

Результаты численного моделирования адекватно воспроизводят данные самолетных измерений температуры (рис. 1, в), однако экспериментальная кривая — более гладкая по сравнению с модельной. Похожая картина наблюдается для абсолютной влажности (рис. 1, г). Сравнение смоделированных значений скорости ветра (рис. 1, д) с данными измерений показывает высокую степень согласия. Направление ветра (рис. 1, е), полученное при численном моделировании, соответствует результатам самолетного зондирования.

Описанная картина различий между результатами моделирования и данными самолетного зондирования наблюдается для всех трех вылетов. Рас-

хождения максимальные внутри пограничного слоя атмосферы до высот 1500–2000 м.

Сравнение газового и аэрозольного состава

Диоксид серы SO_2 — основной загрязнитель Норильской промышленной зоны. Поэтому рассмотрим результаты его измерений и моделирования подробно для каждого вылета (рис. 2, цветная вкладка).

Самолетные измерения 3 августа 2004 г. проводились по схеме «крест» на высоте (1200 ± 15) м и по прямой трассе на высоте (500 ± 18) м. Во время линейного полета на высоте (500 ± 18) м (рис. 2, а) шлейф был расположен немного южнее траектории полета самолета. Измерения зафиксировали увеличение концентрации SO_2 в районе максимума шлейфа. При зондировании на высоте (1200 ± 15) м (рис. 2, б) шлейф выбросов попал между основными лучами «креста» и только незначительная его часть была зафиксирована.

На рис. 2, в, г приведены данные самолетного зондирования 10 августа и соответствующие результаты численного моделирования. Согласно модельным расчетам (рис. 2, в), шлейф оказался южнее положения, зафиксированного в ходе самолетного зондирования на высоте (500 ± 28) м. Несмотря на некоторое смещение, измеренные и рассчитанные концентрации в шлейфе составили 61 и 58 млрд^{-1} соответственно. Во время линейного прохода на высоте (500 ± 106) м (рис. 2, г) шлейф был расположен восточнее траектории полета, вследствие чего приборы его не зарегистрировали.

Наиболее подробно удалось исследовать шлейф 13 августа. На рис. 2, д показано, что, согласно результатам моделирования, самолет должен был подойти к шлейфу выбросов, но бортовые приборы не зарегистрировали увеличение концентрации SO_2 в этот момент. Рост концентрации был зафиксирован позже (рис. 2, е), но ее максимум был расположен северо-западнее положения, полученного при численном моделировании.

Далее (рис. 2, ж) траектория полета была направлена на юг и огибала хребет Лонгдокойский камень. При этом шлейф выбросов зафиксирован не был, что совпадает с результатами моделирования. Затем полет проходил по прямой в юго-западном направлении (рис. 2, з), в шлейфе выбросов SO_2 . Приборы на борту самолета зафиксировали его, однако максимум концентрации SO_2 в шлейфе выбросов был расположен севернее, чем по результатам моделирования. Из данных, представленных на рис. 2, можно сделать вывод, что модель адекватно восстанавливает поле концентрации SO_2 с учетом его незначительного смещения в северо-западном направлении относительно данных измерений.

Остальные газы (озон и угарный газ) и аэрозольные составляющие, измеренные с борта самолета, менее значимы с точки зрения загрязнения для Норильской промышленной зоны. Проиллюстрируем сравнение на примере вылета 13 августа

2004 г. (рис. 3 и 4, цветные вкладки). Выводы будут справедливы и для остальных вылетов.

На рис. 3 видно, что смоделированное поле концентрации озона на высоте (400 ± 85) м представляет распределение озона пятнами, с разбросом значений в пределах $25\text{--}35$ млрд⁻¹. Его сопоставление с данными самолетного зондирования (рис. 3, а, б) демонстрирует, что модельные оценки адекватно воспроизводят пространственное положение экстремумов концентрации озона, присутствующие в данных измерений. Однако модельные расчеты занижают концентрации озона относительно данных измерений. Наибольшее различие достигается в области шлейфа (рис. 3, б), где измеренные концентрации выше примерно на 10 млрд⁻¹.

Сравнение результатов численного моделирования поля концентрации угарного газа с данными самолетного зондирования (рис. 3, в, г) отчетливо показывает, что модельные значения концентрации СО сильно занижены (примерно в 100 раз) как для фонового района, так и для зоны шлейфа. Причина такого расхождения, вероятно, в том, что в исходной базе данных источников эмиссий EDGAR V.4.2 величина эмиссии СО сильно занижена. Поэтому подробный анализ различий не проводился. Результаты представлены в качестве примера.

Из рис. 3, д следует, что модель завышает значения концентрации аэрозольных частиц РМ_{2,5} в шлейфе выбросов в сравнении с измеренными: модельные оценки достигают $6\text{--}8$ мкг/м³, тогда как по результатам самолетного зондирования концентрация аэрозольных частиц в шлейфе увеличивалась до 2 мкг/м³. Причем согласно данным самолетного зондирования, увеличение концентрации наблюдалось только в районе источника (рис. 3, е), а затем она уменьшалась до фоновых значений.

На временных развертках полета (рис. 4) 13 августа 2004 г. показано, что модель восстанавливает большую часть экстремумов, присутствующих в данных измерений. Для сернистого ангидрида модель завышает значения концентрации в максимумах до $1,5$ раз (рис. 4, а). Различия между модельными расчетами и самолетными измерениями концентрации озона могут достигать 10 млрд⁻¹ (рис. 4, б). Для аэрозольной фракции РМ_{2,5} модель четко воспроизводит максимумы, но значения могут быть завышены до 4 раз (рис. 4, г).

Численные оценки расхождений между результатами моделирования и данными самолетного зондирования для трех вылетов приведены в таблице.

Из данных, представленных в таблице, можно сделать вывод, что проведенные модельные расчеты метеорологических параметров, газового и аэрозольного составов неплохо согласуются с данными самолетного зондирования с учетом разрешения сетки модели. Расхождения между данными измерений и модельными расчетами лежат в пределах погрешности методов измерений параметров с борта самолета, а также пространственной и временной погрешностей модели, включающей усреднение результирующих значений до размера ячейки и шага по времени.

Статистические характеристики различий между измеренными и смоделированными значениями исследуемых величин для всех вылетов

Параметр	$m \pm \sigma$	СКО	r	СО	СНО, %	N
$T, ^\circ\text{C}$	$0,1 \pm 5,4$ $-0,8 \pm 6,7$	2,2	0,97	1,0	1,9	695
$q, \text{г/кг}$	$2,8 \pm 0,9$ $3,4 \pm 1,1$	0,8	0,84	-0,5	26,9	695
$V_s, \text{м/с}$	$6,3 \pm 2,1$ $4,7 \pm 1,5$	2,3	0,56	1,5	-19,8	695
$V_d, \text{град}$	195 ± 93 204 ± 103	35,0	0,94	-9,7	6,0	695
$\text{SO}_2, \text{млрд}^{-1}$	$11,9 \pm 17,8$ $4,6 \pm 17,2$	23,0	0,23	7,3	-62,6	695
$\text{PM}_{2,5}, \text{мкг/м}^3$	$1,9 \pm 1,5$ $1,6 \pm 2,2$	2,6	0,05	0,2	38,2	695
$\text{O}_3, \text{млрд}^{-1}$	$36,0 \pm 11,3$ $35,0 \pm 6,9$	9,8	0,51	0,9	1,6	695

Примечание. T – температура воздуха; q – отношение смеси; V_s – скорость, V_d – направление ветра; $m \pm \sigma$ – среднее значение величины со среднеквадратическим отклонением; СКО – среднеквадратическая ошибка модели; СО – средняя ошибка модели; r – коэффициент корреляции; СНО – средняя нормированная ошибка модели; N – число точек, использовавшихся для расчета. Модельные значения выделены курсивом.

Заключение

Проведенное исследование показало, что выбранная конфигурация модели WRF-CHEM v3.5.1 адекватно воспроизводит метеорологические параметры, которые наблюдались в измерительной кампании в 2004 г.

Результаты численного моделирования распределения концентраций сернистого ангидрида и озона и массовой концентрации аэрозоля качественно воспроизводят распределения, полученные в ходе самолетного зондирования. Количественные оценки показали, что среднеквадратические ошибки для сернистого ангидрида, массовой концентрации аэрозоля РМ_{2,5} и озона, рассчитанные для всех трех вылетов, составили 23 млрд⁻¹, $2,6$ мкг/м³, $9,8$ млрд⁻¹ соответственно.

Причинами таких расхождений могут быть некорректность задания начальных и граничных условий, неточности задания антропогенных эмиссий, ограничения в используемых аэрозольном и химическом механизмах.

Опыт использования модели WRF-CHEM v3.5.1 доказал ее применимость для численных исследований переноса и трансформации примесей. В следующих работах мы планируем провести численные эксперименты с учетом полученных результатов для зимних условий с применением более совершенных аэрозольных алгоритмов переноса и трансформации, имеющихся в арсенале модели, и результатов моделирования глобальных химико-транспортных моделей для задания начальных и граничных условий.

Исследование выполнено в рамках гранта РНФ (проект № 17-17-01095), с использованием ресурсов ЦКП Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиГ СО РАН.

1. Обзор состояния и загрязнения окружающей среды в Российской Федерации за 2015 г. М.: Росгидромет, 2016. 224 с.
2. Першина Н.А., Полищук А.И., Свистов П.Ф. К вопросу о закислении атмосферных осадков в российской Арктике // Тр. ГГО им. А.И. Воейкова. 2008. № 558. С. 211–232.
3. Виноградова А.А., Максименков Л.О., Погарский Ф.А. Изменения атмосферной циркуляции и загрязнения окружающей среды в Сибири от промышленных районов Норильска и Урала в начале XXI в. // Оптика атмосфер. и океана. 2009. Т. 22, № 6. С. 527–534.
4. Куценогий К.П., Смирнова А.И., Смоляков Б.С. Оценка содержания некоторых компонентов в выбросах промышленных предприятий Южного Урала и Норильска // Оптика атмосфер. и океана. 2002. Т. 15, № 5–6. С. 460–463.
5. Шлычков В.А., Мальбахов В.М., Леженин А.А. Численное моделирование атмосферной циркуляции и переноса загрязняющих примесей в Норильской долине // Оптика атмосфер. и океана. 2005. Т. 18, № 5–6. С. 490–496.
6. Леженин А.А., Рапута В.Ф., Ярославцева Т.В. Численный анализ атмосферной циркуляции и распространения загрязняющих примесей в окрестностях Норильского промышленного района // Оптика атмосфер. и океана. 2016. Т. 29, № 6. С. 467–471; Lezhenin A.A., Raputa V.F., Yaroslavtseva T.V. Numerical analysis of atmospheric circulation and pollution transfer in the environs of Norilsk Industrial Region // Atmos. Ocean. Opt. 2016. V. 29, N 6. P. 565–569.
7. Зуев Д.В., Кашкин В.Б. Анализ выбросов диоксида серы по данным инструмента ОМІ (спутник AURA) для Норильской промышленной зоны. // Оптика атмосфер. и океана. 2013. Т. 26, № 9. С. 793–797.
8. Корец М.А., Рыжкова В.А., Данилова И.В. Использование ГИС для оценки состояния наземных экосистем Норильского промышленного района // Сиб. экол. ж. 2014. № 6. С. 887–902.
9. Аришинов М.Ю., Белан Б.Д., Давыдов Д.К., Ивлев Г.А., Пирогов В.А., Симоненков Д.В., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В. Комплексная оценка состояния воздушного бассейна Норильского промышленного района. Ч. 1. Размеры и динамика колонки примесей // Оптика атмосфер. и океана. 2006. Т. 19, № 5. С. 441–447.
10. Аришинов М.Ю., Белан Б.Д., Давыдов Д.К., Ивлев Г.А., Пестунов Д.А., Рассказчикова Т.М., Симоненков Д.В., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В. Комплексная оценка состояния воздушного бассейна Норильского промышленного района. Ч. 2. Баланс примесей в зоне Норильска // Оптика атмосфер. и океана. 2006. Т. 19, № 7. С. 622–631.
11. Аришинов М.Ю., Белан Б.Д., Ивлев Г.А., Краснов О.А., Рассказчикова Т.М., Симоненков Д.В., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В. Комплексная оценка состояния воздушного бассейна Норильского промышленного района. Ч. 3. Распространение примесей // Оптика атмосфер. и океана. 2006. Т. 19, № 9. С. 798–805.
12. Аришинова В.Г., Белан Б.Д., Ивлев Г.А., Рассказчикова Т.М., Симоненков Д.В., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В. Комплексная оценка состояния воздушного бассейна Норильского промышленного района. Ч. 4. Вертикальная стратификация примесей // Оптика атмосфер. и океана. 2006. Т. 19, № 10. С. 905–908.
13. Белан Б.Д., Задде Г.О., Ивлев Г.А., Краснов О.А., Пирогов В.А., Симоненков Д.В., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В. Комплексная оценка состояния воздушного бассейна Норильского промышленного района. Ч. 5. Примеси в приземном слое воздуха. Соответствие состава воздуха гигиеническим нормативам. Рекомендации // Оптика атмосфер. и океана. 2007. Т. 20, № 2. С. 132–142.
14. Grell G.A., Peckham S.E., Schmitz R., McKeen S.A., Frost G., Skamarock W.C., Eder B. Fully coupled “online” chemistry in the WRF model // Atmos. Environ. 2005. V. 39, iss. 37. P. 6957–6976.
15. Kuik F., Lauer A., Churkina G., Denier van der Gon H.A.C., Fenner D., Mar K.A., Butler T.M. Air quality modelling in the Berlin–Brandenburg region using WRF-Chem v3.7.1: Sensitivity to resolution of model grid and input data // Geosci. Model Dev. 2016. V. 9, iss. 12. P. 4339–4363. <https://doi.org/10.5194/gmd-9-4339-2016>.
16. Mar K.A., Ojha N., Pozzer A., Butler T.M. Ozone air quality simulations with WRF-Chem (v3.5.1) over Europe: Model evaluation and chemical mechanism comparison // Geosci. Model Dev. 2016. V. 9, iss. 10. P. 3699–3728. <https://doi.org/10.5194/gmd-9-3699-2016>.
17. Abou Rafee S.A., Martins L.D., Kawashima A.B., Almeida D.S., Morais M.V.B., Souza R.V.A., Oliveira M.B.L., Souza R.A.F., Medeiros A.S.S., Urbina V., Freitas E.D., Martin S.T., Martins J.A. Contributions of mobile, stationary and biogenic sources to air pollution in the Amazon rainforest: A numerical study with the WRF-Chem model // Atmos. Chem. Phys. 2017. V. 17, iss. 12. P. 7977–7995. <https://doi.org/10.5194/acp-17-7977-2017>.
18. Marelle L., Raut J.-C., Thomas J.L., Law K.S., Quennehen B., Ancellet G., Pelon J., Schwarzenboeck A., Fast J.D. Transport of anthropogenic and biomass burning aerosols from Europe to the Arctic during spring 2008 // Atmos. Chem. Phys. 2015. V. 15, iss. 7. P. 3831–3850. <https://doi.org/10.5194/acp-15-3831-2015>.
19. Zhang Y., Zhang X., Zhang Q., He K., Wang L., Duan F. Application of WRF-CHEM over East Asia: Part I. Model evaluation and intercomparison with MM5/CMAQ // Atmos. Environ. 2016. V. 124, part B. P. 285–300.
20. Zhang Y., Zhang X., Zhang Q., He K., Wang L., Duan F. Application of WRF-CHEM over East Asia: Part II. Model improvement and sensitivity simulations // Atmos. Environ. 2016. T. 124, part B. P. 301–320.
21. Hong S.-Y., Dudhia J., Chen S.-H. A revised approach to ice microphysical processes for the bulk parameterization of clouds and precipitation // Mon. Weather Rev. 2004. V. 132, N 1. P. 103–120.
22. Mlawer E.J., Taubman S.J., Brown P.D., Iacono M.J., Clough S.A. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-k model for the longwave // J. Geophys. Res.: Atmos. 1997. V. 102, N D14. P. 16663–16682.
23. Dudhia J. Numerical study of convection observed during the winter monsoon experiment using a mesoscale two-dimensional model // J. Atmos. Sci. 1989. V. 46, N 20. P. 3077–3107.
24. Beljaars A.C. The parametrization of surface fluxes in large-scale models under free convection // Q. J. R. Meteorol. Soc. 1995. V. 121, N 522. P. 255–270.
25. Hong S.-Y., Noh Y., Dudhia J. A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes // Mon. Weather. Rev. 2006. V. 134, N 9. P. 2318–2341.
26. Chen F., Dudhia J. Coupling an advanced land surface–hydrology model with the Penn State–NCAR MM5 Modeling System. Part I: Model implementation and sensitivity // Mon. Weather. Rev. 2001. V. 129, N 4. P. 569–585.
27. Grell G.A., Dévényi D. A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and data assimilation techniques // Geophys. Res. Lett. 2002. V. 29, N 14. P. 38.

28. Stockwell W.R., Kirchner F., Kuhn M., Seefeld S. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modelling // *J. Geophys. Res.: Atmos.* 1997. V. 102, N D22. P. 25847–25879.
29. Chin M., Rood R.B., Lin S.-J., Müller J.-F., Thompson A.M. Atmospheric sulfur cycle simulated in the global model GOCART: Model description and global properties // *J. Geophys. Res.: Atmos.* 2000. V. 105, N D20. P. 24671–24687.
30. Damian V., Sandu A., Damian M., Potra F., Carmichael G.R. The kinetic PreProcessor KPP – A software environment for solving chemical kinetics // *Comput. Chem. Eng.* 2002. V. 26, N 11. P. 1567–1579.
31. Peng G. What's the difference between FNL and GFS [Electronic resource] // NOAA/National Weather Service National Centers for Environmental Prediction, 2014. URL: <http://rda.ucar.edu/datasets/ds083.2/docs/FNLvGFS.pdf> (last access: 25.01.2017).
32. Saha S., Moorthi S., Wu X., Wang J., Nadiga S., Tripp P., Behringer D., Hou Y.-T., Chuang H.-Y., Iredell M., Ek M., Meng J., Yang R., Peca M., van den Dool H., Zhang Q., Wang W., Chen M., Becker E. The NCEP Climate Forecast System Version 2 [Electronic resource] // NOAA/ National Weather Service National Centers for Environmental Prediction, 2013. URL: http://cfs.ncep.noaa.gov/cfsv2.info/CFSv2_paper.pdf (last access: 25.01.2017).
33. Зуев В.Е., Белан Б.Д., Кабанов Д.М., Ковалевский В.К., Лукьянов О.Ю., Мелешкин В.Е., Микушев М.К., Панченко М.В., Пеннер И.Э., Покровский Е.В., Сакерин С.М., Терпугова С.А., Толмачев Г.Н., Тумаков А.Г., Шаманаев В.С., Щербатов А.И. Самолет-лаборатория Ан-30 «Оптик-Э» для экологических исследований // *Оптика атмосф. и океана.* 1992. Т. 5, № 10. С. 1012–1021.
34. Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Давыдов Д.К., Ивлев Г.А., Козлов А.С., Козлов В.С., Панченко М.В., Пеннер И.Э., Пестунов Д.А., Сафатов А.С., Симоненков Д.В., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В., Шаманаев В.С., Шмаргунов В.П. Самолет-лаборатория Ан-30 «Оптик-Э»: 20 лет исследований окружающей среды // *Оптика атмосф. и океана.* 2009. Т. 22, № 10. С. 950–957.

P.N. Antokhin, A.V. Gochakov, A.B. Kolker, A.V. Penenko. Comparison of the calculation results of the chemical transport model WRF-CHEM with airborne measurements in Norilsk.

The verification of the results of WRF-CHEM model simulation of anthropogenic emission distributions over Norilsk industrial zone using airborne sounding data for August 2004 is carried out. The study showed that the selected configuration of the WRF-CHEM v3.5.1 model adequately reproduces the meteorological parameters measured during the campaign of 2004. The simulated distributions of the concentrations of sulphur dioxide and ozone and mass concentration of aerosol qualitatively reproduce the distributions obtained during the airborne sounding. Quantitative estimates show that the standard errors for sulphur dioxide, the mass concentration of aerosol PM_{2.5}, and ozone calculated for three flights are 23 ppb, 2.6 µg/m³, and 9.8 ppb, respectively. Possible reasons for such discrepancies may be incorrect specification of the initial and boundary conditions, inaccurate values of anthropogenic emissions, and limitations to the aerosol and chemical mechanisms used.

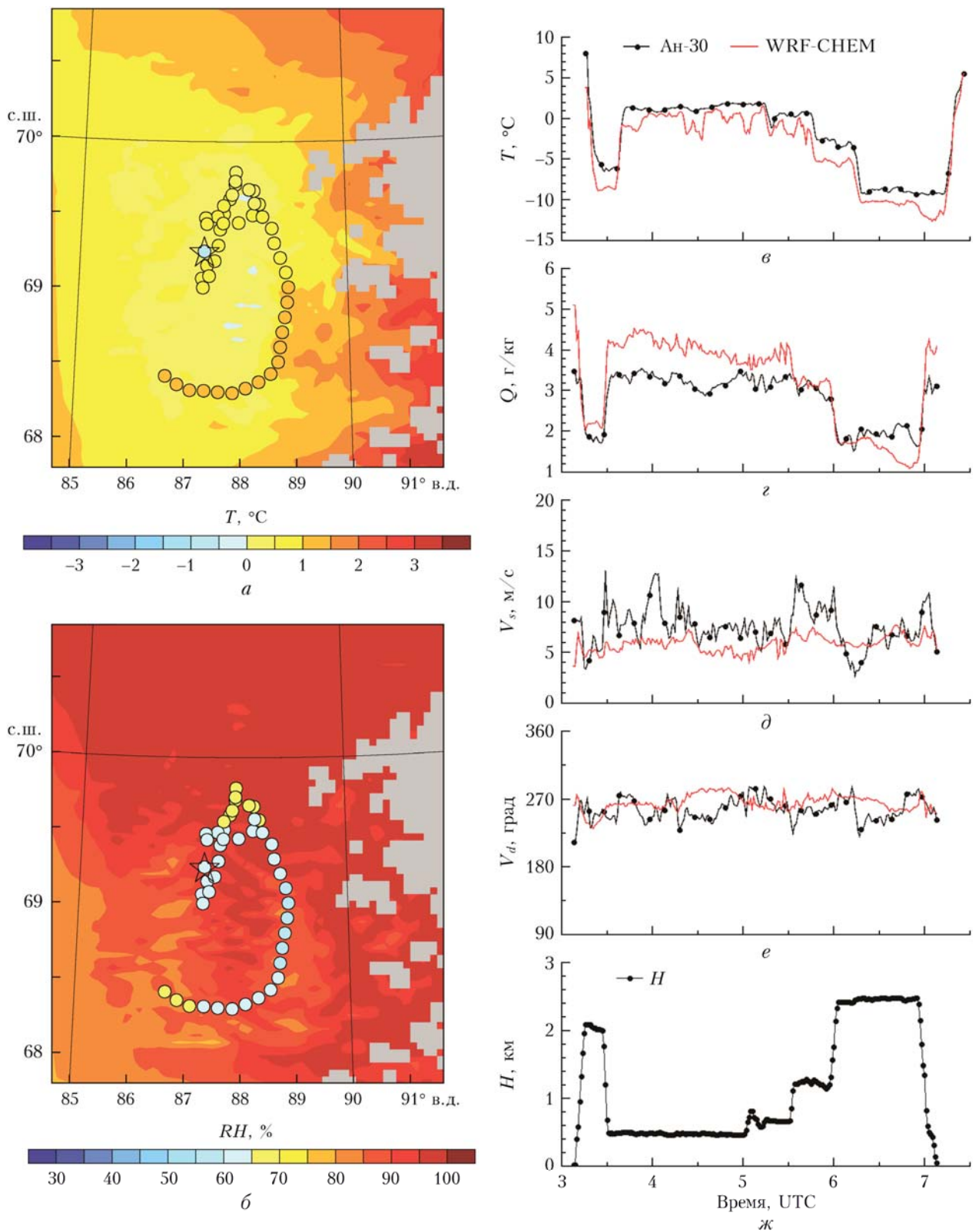


Рис. 1. Распределение температуры (а) и относительной влажности (б) на 04:00 10 августа 2004 г. на высоте (500 ± 10) м (самолетные измерения за время с 03:30 до 04:30 показаны кружками; серым отмечены горы). Временная развертка самолётного зондирования 10 августа 2004 г.: температура (е), абсолютная влажность (z), скорость (д) и направление ветра (e), высота полета (ж). Звездочкой отмечено начало траектории

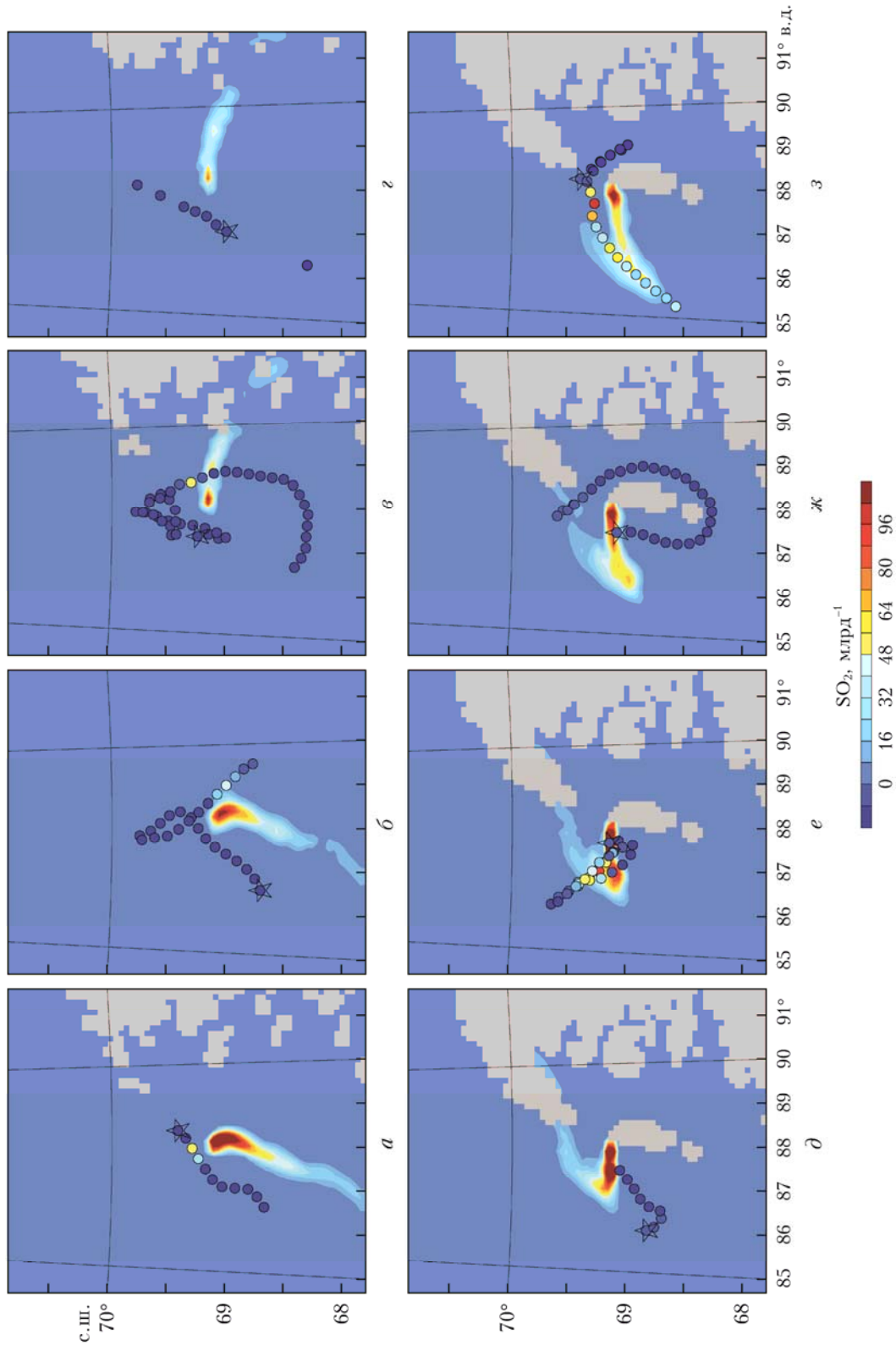


Рис. 2. Сравнение результатов моделирования и самолетных измерений (показаны кружками) концентрации SO_2 : 3 августа 2004 г. в 06:00 UTC на высоте (500 ± 18) м (а), в 07:00 UTC на высоте (1200 ± 15) м (б); 10 августа 2004 г. в 04:00 UTC на высоте (500 ± 28) м (в), в 05:00 UTC на высоте (500 ± 106) м (г); 13 августа 2004 г. в 05:00 UTC на высоте (400 ± 80) м (д), в 06:00 UTC на высоте (400 ± 69) м (е), в 07:00 UTC на высоте (400 ± 70) м (ж), в 08:00 UTC на высоте (400 ± 91) м (з) (серым показаны повышенные формы рельефа)

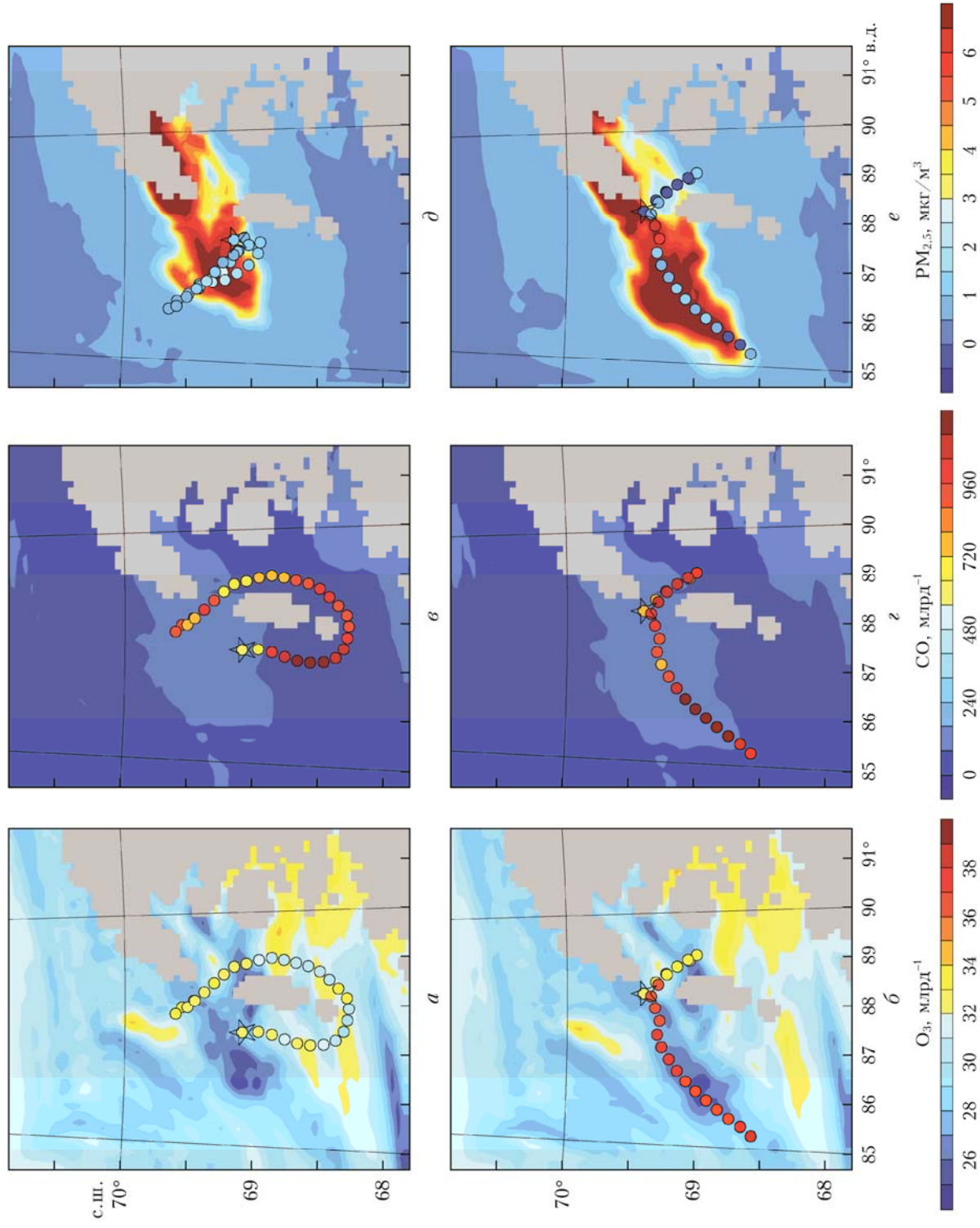


Рис. 3. Сравнение результатов моделирования и самолетных измерений (показаны кружками) полей концентрации озона (*a, б*), угарного газа (*в, г*) и массовой концентрации аэрозоля PM_{2.5} (*д, е*) на высоте (400 ± 85) м для 13 августа 2004 г. в 07:00 (*a, в*), 08:00 (*б, г, е*), 06:00 UTC (*д*) (серым показаны повышенные формы рельефа)

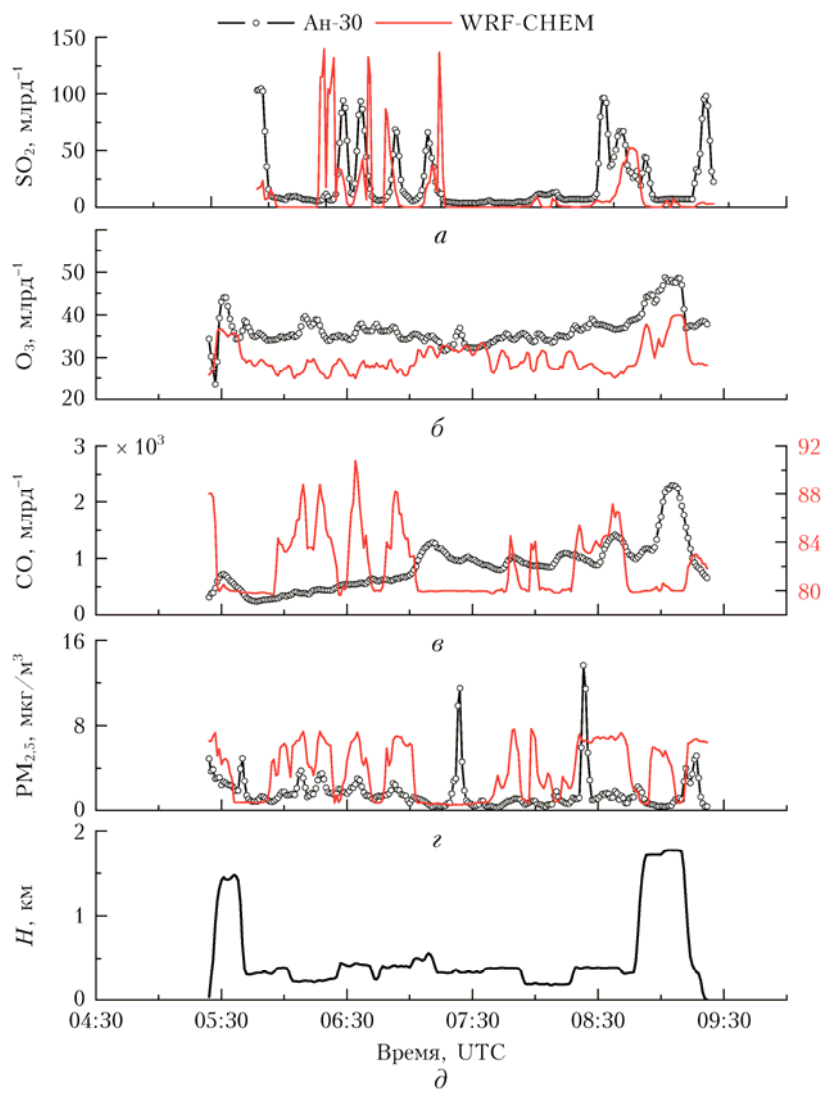


Рис. 4. Временная развертка полета 13 августа 2004 г.: сернистый ангидрид (*a*), озон (*б*), угарный газ (*в*), массовая концентрация аэрозоля $\text{PM}_{2.5}$ (*г*), высота полета (*д*)