

# 多元大气 数值模拟

王书仁 陈献伟 编著  
游永乾 王贵勤

气象出版社

受到自然科学基金资助，项目标号48970258

# 多元大气数值模拟

王书仁 陈献伟 编著  
游永乾 王贵勤

高等教育出版社

(京) 新登字046号

### 内 容 简 介

本书系统介绍多元大气数值模拟的主要知识。全书共九章，分别介绍大气的组成；各种成分的光化学过程以及它们的输运；辐射对大气的加热和冷却作用；各种过程的相互影响；光化学动力学模拟的基本模式，边界条件，吉尔 (Gear) 方法；自然界和人类活动对臭氧层和气候的影响。最后具体介绍作者实际运行的一维时变光化模式。

本书内容涉及到多学科知识，写作时考虑了读者的不同专业背景。本书适合于大专院校气象学、大气物理学、大气化学、气候学、环境科学及空间物理学专业的高年级学生、研究生及教师阅读。对于相应学科的研究人员也有一定参考价值。

### 多元大气数值模拟

王书仁 陈献伟 编著  
游永乾 王贵勤  
责任编辑 成秀虎

气象出版社出版

(北京西郊白石桥路46号)

北京昌平环球科技印刷厂印刷

新华书店总店科技发行所发行 全国各地新华书店经销

\*

开本：787×1092 1/32 印张：8.875 字数：195千字

1992年12月第一版 1992年12月第一次印刷

印数：1—1000

ISBN 7-5029-1006-9/P·0512

定价：6.90元

# 前 言

包围地球的大气层主要是由氧和氮的分子组成，另外还包括几十种微量成分，因此从热力学角度看大气是多元系热力学系统。但是，在目前对大气动力学和热力学的研究中，人们多采用一种简化的大气模型，把大气中处于不同能态及化学成分不同的分子，用一种力学性质、化学性质完全相同的“空气分子”来代替，即把大气看做是一单元系的热力学系统。这种用单元系代替多元系的方法，简化了计算过程，在对流层的研究中取得了很大的成功。在计算机技术不太发达的年代，这种简化更具有实际意义。

大气的单元系模型忽视了大气中不同化学成分的光化学反应过程对臭氧和气候的影响。近年来的观测资料表明，大气中二氧化碳的增加和高层大气中臭氧的变化都对全球气候产生显著的影响，在世界上引起了学术界和各国政府的关注。在这些问题的研究中，大气的单元系模型暴露了自己的局限性。

近年来计算机技术的发展，给多元大气的数值模拟研究提供了可能。许多学者公布了自己的大气光化学动力学模式的研究结果。对大气光化学和动力学的研究必定使人们对大气的认识更加深入细致，这将提高天气预报的准确性，提高对大气环境评估的正确性。我国的光化学和动力学数值模拟，目前还处于刚刚起步的阶段。我们希望本书能对我国的多元大气数值模拟研究和教学做一点贡献。

多元系大气的计算机模拟，既要模拟大气中的动力学过

程，又要模拟大气中的光化学过程以及两种过程之间的相互影响，本书系统地介绍了多元大气数值模拟的主要知识。全书共九章，分别介绍大气的组成；各种成分的光化学过程；它们的输运；辐射对大气的加热和冷却作用；各种过程的相互影响；光化学动力学模拟的基本模式、边界条件、吉尔(Gear)方法；自然界和人类活动对臭氧层的影响；最后具体介绍作者实际运行的一维时变光化模式。

由于多元大气数值模拟的复杂性，加之对此领域还有许多尚未了解的知识和模糊认识，对上述各方面内容的描述详略不同。我们的目的在于提出一些有益的描述和信息，以使读者理解这些问题的实质。希望初学者读完此书能对大气光化学动力学数值模拟方法有个较全面的了解，并能独立地开展数值模拟工作。

我们研究的大气光化学动力学模式，考虑了三十六种大气成分的光化学反应、输运过程及热力学效应，比单元系的大气数值模式更接近于大气的实际情况。由于三十六种成分的光化常数彼此相差甚大（几个数量级），在用数值方法求解它们的联立方程组（这样的方程组称为病态方程或Stiff方程）时，遇到的棘手问题就是如何选择适当的时间步长才能得到稳定的解。本书将介绍解决这一问题的吉尔(Gear)方法。

本书介绍的模式是由北京大学地球物理系的王贵勤副教授与德国马普高空物理研究所(Max-Planck-Institut für Aeronomie)的Fabian教授共同开创的。而后，在王贵勤的指导下，由我们共同研制成功，全书由北京气象学院的陈献伟和北京大学的王书仁两位同志执笔，北京大学计算中心的游永乾同志设计调试了本书提供的部分应用程序，最后由王

贵勤同志审核了全书。

本书内容涉及到多学科知识，写作时考虑了读者的不同专业背景。本书适合于大专院校气象学、大气物理学、大气化学、环境科学、气候学及空间物理专业的高年级学生、研究生及教师阅读。对于相应学科的研究人员也有一定参考价值。

最后，我们要衷心感谢北京大学计算中心，特别是童建昌、孙光斗、陈士龙、韩少荣等同志对我们的研究工作所给予的大力支持和帮助。

由于时间仓促，加之作者学识有限，书中难免存在疏漏和不当之处，敬请读者不吝指正。

作者

1991年6月于北京

# 目 录

## 前言

第一章 大气结构	(1)
1.1 大气的热力学结构	(1)
1.2 大气的气压与密度	(7)
1.3 大气的组成	(8)
第二章 太阳辐射在大气中的传输	(15)
2.1 太阳光谱和辐射单位	(15)
2.2 入射太阳辐射强度	(16)
2.3 太阳辐射强度的衰减	(17)
2.4 光程的计算	(29)
第三章 光的吸收与光解作用	(35)
3.1 光解系数	(35)
3.2 吸收截面	(36)
3.3 各种分子离解系数随高度的变化	(57)
第四章 臭氧与大气化学	(62)
4.1 纯氧大气中的臭氧形成理论	(62)
4.2 催化反应对奇氧损失的作用	(68)
4.3 化学反应速率常数	(70)
4.4 中层大气中的化学反应	(74)
第五章 大气光化学动力学模拟	(78)
5.1 一维模式	(78)
5.2 多维模式	(134)
5.3 大气运动的示踪物	(135)
5.4 中层大气中的大气环流	(145)
5.5 行星波产生的涡旋输送通量	(162)

5.6	中间层和热层下部的重力内波和涡旋扩散	(166)
5.7	二维大气光化动力模拟的数值方法	(168)
<b>第六章</b>	<b>平流层臭氧的变化</b>	<b>(171)</b>
6.1	长期变化	(171)
6.2	短期变化	(177)
6.3	平流层臭氧与太阳的周期变化	(182)
<b>第七章</b>	<b>环境对平流层臭氧的影响</b>	<b>(184)</b>
7.1	超音速飞机	(184)
7.2	氟利昂	(188)
7.3	CO <sub>2</sub> 的增加	(192)
7.4	氮肥	(194)
<b>第八章</b>	<b>中层大气中的辐射加热和冷却</b>	<b>(199)</b>
8.1	短波(太阳)辐射的加热率	(199)
8.2	长波(地球)辐射的传输和大气冷却率	(221)
8.3	辐射、光化学和动力学之间的相互耦合	(241)
<b>第九章</b>	<b>一维大气光化-对流时变模式程序</b>	<b>(249)</b>
9.1	一维大气光化-对流时变模式主程序	(249)
9.2	两个数据文件介绍	(260)
<b>参考文献</b>		<b>(261)</b>



# 第一章 大气结构

气象学家习惯于把大气分为低层大气和高层大气，对流层顶（在赤道上空大约16km；在极地上空大约8km）以上为高层大气，其下为低层大气。近些年来，由于对平流层臭氧、二氧化碳等问题的关注，科学家又提出“中层大气”这个名词，它主要包括平流层和中间层。因为对流层上部和热层的底部与中层大气有很强的耦合作用，所以中层大气学所研究的范围是从地面附近直至100km高空的一个广阔的空间。

在介绍大气化学和动力学的内容之前，本章先介绍一下大气的结构及有关术语，然后讨论中层大气中的压力和各种成分密度的分布规律。中层大气中的主要成分是氮和氧的分子，对于其中的微量成分，根据它们的起源和产生机制分为源气体和次生气体。最后简要讨论一下支配微量成分全球分布的动力学和化学过程。

## 1.1 大气的热力学结构

如图1.1所示，根据大气温度的垂直变化特征，地球周围的大气被划分成许多“环壳”或“层”，并用“顶”表示各层的顶部。

**对流层** 对流层中平均温度从地面到对流层顶，随高度增加而降低。地面平均温度在低纬度约300K，在高纬度约260K。对流层顶在热带约16km高，温度180K；在两极附近约10km高，温度230K。对流层的热力学结构主要取决于太阳辐射引起的地面加热，以及湍流混合与对流引起的向上

的热量输送。大气运动也将热量从加热较强的赤道地区向极地方向输送。

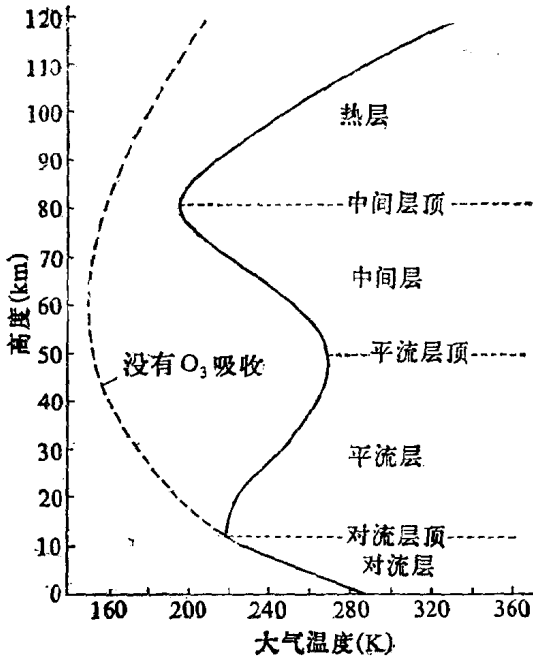


图1.1 大气温度的垂直分布曲线  
虚线表示大气中不含O<sub>3</sub>时的温度垂直分布曲线

当干空气团从气压较高的区域，向上运动到气压较低的区域时，大气由于绝热膨胀做功而冷却。反之，气团向下运动将因绝热压缩而升温。因此，在对流层里，上面的空气温度低，下面的空气温度高。由对流过程产生的温度随高度增加而降低的速率叫做干绝热直减率，用 $\Gamma_d$ 来表示。可以用下面的方法求出 $\Gamma_d$ 。将静力方程和位温表达式联立

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} = -g \quad (1.1)$$

$$\frac{T}{\Theta} = \left[ \frac{p}{1000} \right]^{\kappa} \quad (1.2)$$

对于干空气  $\kappa = R/C_p = 0.286$ ,  $R$  为空气的气体常数。保持  $\Theta$  为常数, 对 (1.2) 式先取对数, 而后对  $z$  求微商得

$$\frac{1}{T} \frac{dT}{dz} = \frac{\kappa}{p} \frac{dp}{dz} \quad (1.3)$$

再应用 (1.1) 式, 上式可化成

$$\Gamma_d = -\frac{dT}{dz} = \frac{g}{C_p} \quad (1.4)$$

如果位温随高度变化, 那么实际的递减率  $\Gamma$  与干绝热直减率有差异。(1.4) 式中  $g$  为重力加速度,  $C_p$  为定压比热容,  $C_p \approx 1.005 \times 10^3 \text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。在对流层内  $\Gamma_d \approx 9.8 \text{K/km}$ 。

在湿空气中, 伴随气团上升引起的温度降低会使其中的水汽冷凝, 放出潜热。这一加热使温度直减率减少到

$$\Gamma_s = \Gamma_d \frac{1 + \frac{Lw}{R \cdot T}}{1 + \frac{Lw}{C_p E} \frac{dE}{dT}} \quad (1.5)$$

式中  $L$  是凝结潜热 ( $0^\circ \text{C}$  时,  $L = 2.5 \times 10^6 \text{J/kg}$ ),  $w$  是水汽总量 ( $\text{kg/mol}$ ),  $R$  是普适气体常数 ( $\sim 8.314 \text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ),  $E$  是饱和水汽压 ( $\text{hPa}$ ), 由下式给出

$$\log \frac{E}{610.6} = 9.632(1 - 0.00035t) \cdot \frac{t}{T} \quad (1.6)$$

式中  $t = T - 273$ 。  $\Gamma_s$  称为湿绝热直减率。  $\Gamma_s$  一般小于  $\Gamma_d$ 。在常温常压条件下, 对流层中  $\Gamma_s \approx 6.5 \text{K/km}$ 。这个数值接近

实际观测到的温度直减率的值。如果实际的温度直减率

$$\Gamma = - \frac{dT}{dz} \quad (1.7)$$

小于 $\Gamma_s$ ，大气是稳定的；如果 $\Gamma > \Gamma_s$ ，大气是不稳定的。

显然，温度不能以对流层内的直减率随高度无限制地减小。如果上层大气的温度变得太低，在该处的大气向外空间的长波辐射产生的冷却率将减小。同时由下面来的较强辐射必定引起上层大气变暖。这样，即使没有臭氧的加热，在某一特定高度上，大气的温度也会停止减小。这个临界高度就是对流层顶。

**平流层** 在对流层顶以上，由于臭氧 ( $O_3$ ) 吸收太阳紫外辐射的能量，温度随高度增加，这个温度随高度增长的区域叫平流层。平流层的热力学结构主要取决于它的辐射平衡，而不是像对流层那样取决于对流平衡。在平流层，温度主要是由 $O_3$ 吸收太阳紫外辐射产生的加热和大气红外发射（主要是 $CO_2$ ）产生的冷却之间的辐射平衡状态来确定。由于 $O_3$ 的吸收，太阳的紫外辐射穿过大气层时被衰减，所以产生最大加热的高度稍高于臭氧最大密度的高度（ $\sim 25\text{km}$ ）。大气加热产生的温度变化率等于吸收的能量除以大气比热（ $\rho C_p$ ）。因为后者正比于空气密度，即随高度的增加而迅速减小，所以由 $O_3$ 吸收产生的最高温度出现在比臭氧密度最大值大得多的高度上（ $\sim 50\text{km}$ ）。该温度的最大值（ $\sim 270\text{K}$ ）确定了平流层的上限，称为平流层顶。在平流层的上部和中间层，臭氧强烈地吸收  $200\sim 300\text{nm}$  的太阳辐射，造成了平流层顶的高温区（ $250\text{K}\sim 290\text{K}$ ）。极地夏季时，大气吸收的能量超过大气发射的（主要是二氧化碳和臭氧发射的）红外线能量，超过的部分就是推动平流层上部和中间层大气环流的能

源。极地冬季是能量汇，有能量亏损。于是在平流层上部和中层内产生了与平流层底部的系统相隔离的大气环流系统，而平流层底部的环流一般为对流层的环流所带动。

**中间层** 在平流层顶以上，高度从55km到80km左右的大气称为中间层。在中间层内气温随高度的增加而降低，中间层顶处温度最低。夏季这个最低温度约为150K，是大气层中最冷的区域，有时形成夜光云；冬季这个最低温度在220K左右。这样的温度分布主要是由中层大气上部空气的大尺度环流造成的。因为在这个高度上空气直接吸收的太阳辐射比较少，夏半球 $O_3$ 强烈的加热作用使空气发生大规模的上升运动，绝热冷却作用使气温发生大的跌落。

中层大气一般包括平流层和中间层，但是本书的讨论范围包括对流层上部和热层下部，也就是说从地面附近到100km范围内的大气。中层大气的温度随季节和纬度变化。图1.2 (a) 和 (b) 分别绘出了春分（3月21日）和夏至（6月21日）经圈平面上的中层大气的平均温度分布曲线。图中曲线是根据C. Riegel (1980) 收集整理的数据绘制的。

图1.2中的阴影部分表示对流层顶的近似高度。精确地确定大气温度在垂直方向上停止减小的高度是困难的，在高纬度尤其困难，因为那里的温度随高度变化很小。世界气象组织(WMO)规定，温度直减率小于 $2\text{ K/km}$ 的最低高度为对流层顶。在低纬度地区对流层顶的高度大约为16km；在高纬度地区，大约为8 km。因此，在中纬度地区对流层顶高度有一阶跃，这一过渡区域称为对流层顶断裂带。图1.2显示这一断裂带位于纬度为 $30^\circ$ — $40^\circ$ 区域。由于断裂带的存在，在这一区域上空8—16km的高度范围内低纬度处的温度比高纬度处的温度低。对于平流层和对流层之间进行的空

气与示踪物（水汽，臭氧，放射性物质）的交换，对流层顶

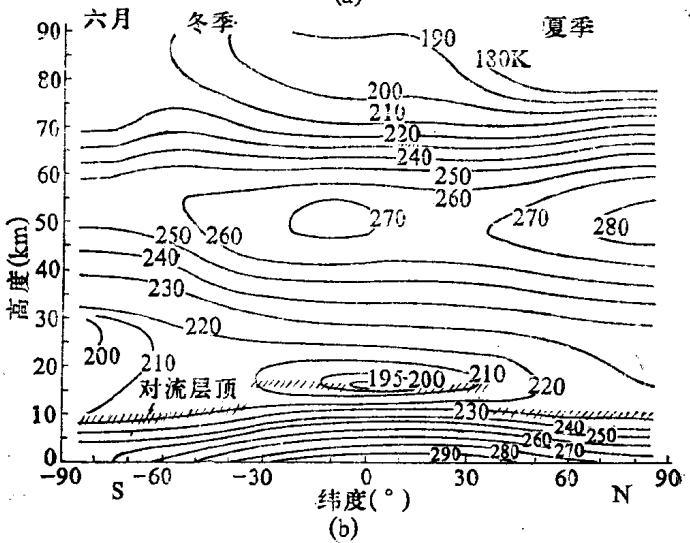
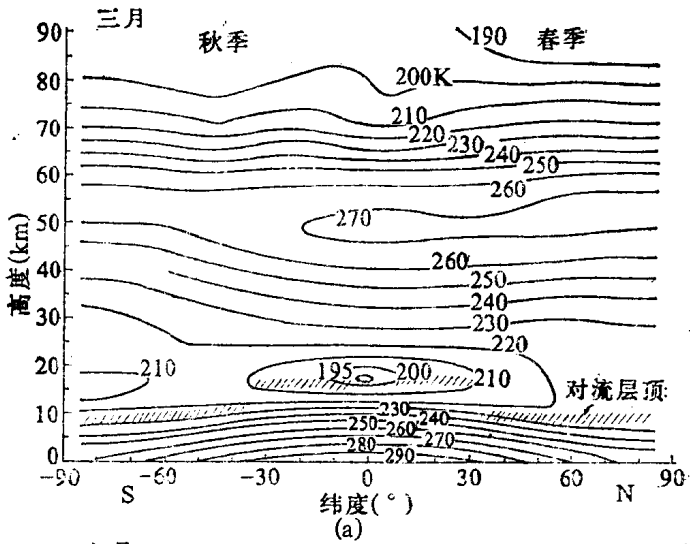


图1.2 经圈平面上的大气等温线

断裂带具有重要作用。

在 $\sim 16\text{km}$ 以上，由于低纬度处太阳天顶角比高纬度处小，所以 $\text{O}_3$ 对低纬度大气的加热作用比高纬度强，低纬度处大气的温度比高纬度处高。根据同一道理，在 $\sim 16\text{km}$ 以上夏季平流层温度比相应的冬季温度高。在中间层，温度的季节变化正相反，夏季中间层比冬季中间层冷。

最后说明一下，对流层顶的高度有季节变化，还随天气有日变化，在反气旋上空要比气旋上空更高更冷。在极地附近也存在对流层顶断裂带。

## 1.2 大气的气压与密度

根据理想气体定律，气压 $p$ 与质量密度 $\rho$ 分别为

$$p = \rho RT \quad (1.8)$$

$$\rho = nm \quad (1.9)$$

式中 $m$ 是大气分子的平均质量， $n$ 是数密度， $R$ 是空气的气体常数

$$R = R^*/m_0 \quad (1.10)$$

式中 $R^*$ 为普适气体常数， $m_0$ 是摩尔质量。应用(1.9)和(1.10)式，(1.8)式可化为

$$p = n \frac{mR^*}{m_0} T = nkT \quad (1.11)$$

式中 $k$ 是单个分子的气体常数，称为Boltzman常数 ( $\sim 1.38 \times 10^{-23} \text{J} \cdot \text{分子}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ )。在静力平衡大气中有

$$\Delta p = -\rho g \Delta z \quad (1.12)$$

用(1.8)或(1.11)式除(1.12)式，得

$$\frac{\Delta p}{p} = -\frac{\Delta z}{H} \quad (1.13)$$

$H$ 称为大气的标高，它可以表示为

$$H = \frac{nkT}{\rho g} = \frac{kT}{mg} = \frac{RT}{g} = \frac{R}{m_0g} T \quad (1.14)$$

对 (1.13) 式积分就得到气压  $p$  的表达式

$$p = p_0 \exp\left(-\int_0^z \frac{dz}{H}\right) \quad (1.15)$$

$p_0$ 是地面处的气压。由 (1.11) 和 (1.13) 式可得数密度的微分方程为

$$-\frac{\partial n}{\partial z} = -\left(\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{1}{H}\right)n \quad (1.16)$$

其积分形式为

$$n = n_0 \frac{T_0}{T} \exp\left(-\int_0^z \frac{dz}{H}\right) \quad (1.17)$$

式中带足标“0”的量，表示在地面的值。在低层大气， $m$ 和 $g$ 随高度变化很小，故 (1.14) 式中的 $H$ 主要随温度变化。在等温大气中，标高用 $H_c$ 表示， $H_c$ 为常量，由 (1.17) 式得

$$n = n_0 e^{-z/H_c} \quad (1.18)$$

如果对流层温度以常数率减小，则 $H$ 随高度线性减小

$$H = H_0 - \gamma z \quad (1.19)$$

将上式代入 (1.17) 式可得

$$n = n_0 \left(\frac{H_0}{H}\right)^{1-\frac{1}{\gamma}} \quad (1.20)$$

在对流层中 $\gamma \approx 0.19$ 。

### 1.3 大气的组成

大气是由多种化学成分构成的混合气体，而且含有一些



非气体物质的悬浮物，如灰尘、气溶胶、烟雾的颗粒等等。近地面层大气的成分如表1.1所示。氮分子和氧分子为大气的主要成分，占99%以上。低、中层大气的运动主要是这两种气体的运动。而微量气体如 $O_3$ ， $H_2O$ 和 $CO_2$ 在大气的辐射加热和冷却的过程中，以及推动大气的运动方面却起着重要作用。微量成分在大气化学过程中同样有重要作用。

表1.1 近地面层大气成分

成 分	分子 量	体 积 百 分 数	重 量 百 分 数
$N_2$	28.01	78.088	75.527
$O_2$	32.00	20.949	23.143
Ar	39.94	0.93	1.28
$CO_2$	44.01	0.03	0.046
Ne	20.18	$1.8 \times 10^{-3}$	$1.25 \times 10^{-3}$
He	4.00	$5.24 \times 10^{-4}$	$7.24 \times 10^{-5}$
$CH_4$	16.05	$1.4 \times 10^{-4}$	$7.25 \times 10^{-5}$
Kr	83.7	$1.14 \times 10^{-4}$	$3.30 \times 10^{-4}$
$N_2O$	44.02	$5 \times 10^{-5}$	$7.6 \times 10^{-5}$
$H_2$	2.02	$5 \times 10^{-5}$	$3.48 \times 10^{-6}$
$O_3$	48.00	$2 \times 10^{-6}$	$3 \times 10^{-6}$
$H_2O$	18.02		

### 1.3.1 平均分子量

在低中层大气中，主要成分 $N_2$ 和 $O_2$ 的相对丰度不变，一直到中间层，大气的平均分子量基本是一个常数( $\sim 28.964$ )。在90km以上，平均分子量开始减小，这说明 $O_2$ 光解为O的效应明显增加，这个临界高度叫均质层顶，其下方是均质层，其上方是非均质层。

在重力场中，分子的扩散效应会使较重的和较轻的气体分离。第*i*种成分的分子扩散系数 $D_i$ 可以表示为