

Сведения о выполненных работах в 2021 году
по проекту «**Разработка математических моделей, численных методов и
комплекса программ для исследования и оперативного прогнозирования
метеорологических явлений и качества атмосферного воздуха в районе
промышленного центра с использованием суперкомпьютера и
приборной базы ЦКП "Атмосфера"**»,
поддержанному Российским научным фондом
Соглашение № 19-71-20042

Руководитель Старченко Александр Васильевич, д-р физ.-мат. наук

В 2021 году по проекту были выполнены следующие работы:

1. Разработана новая фотохимическая мезомасштабная модель, опирающаяся на подход Эйлера, в которой для расчета концентрации компонентов примеси, поступающих в атмосферу города и образующихся в ней в результате химических и фотохимических реакций, используются нестационарные уравнения переноса. Эти уравнения наряду с нестационарным членом содержат слагаемые, представляющие горизонтальную и вертикальную адвекцию и турбулентную диффузию, влажное осаждение, и источниковые члены, моделирующие поступление первичных загрязнителей атмосферного воздуха и химические взаимодействия между активными компонентами примеси. Для описания основных газофазных химических и фотохимических реакций, происходящих в городской атмосфере разработана новая модификация полуэмпирического механизма Generic Reaction Set. Также два уравнения адвективно-диффузионного переноса с источниковыми членами, описывающими химические реакции генерации частиц, добавлены в общую систему уравнений модели переноса примеси и к ним была применена разработанная ранее вычислительная схема решения уравнений «адвекции-диффузии-кинетики». Для проверки адекватности расчетов концентраций частиц PM₁₀ и PM_{2.5} по рассматриваемой модели привлекалась известная модель CAMx и данные наблюдений TOR-станции Института оптики атмосферы СО РАН.

2. В рамках проекта РНФ заключен договор с Институтом вычислительной математики РАН по выполнению научно-исследовательской работы (НИР) по теме «Разработка вычислительных технологий усвоения данных наблюдений приземного слоя атмосферы для мезомасштабного моделирования метеорологических процессов». Результатом этой НИР стала разработка математических методов, вычислительного алгоритма и комплекса компьютерных программ для усвоения данных метеорологических наблюдений, получаемых с помощью наземных метеостанций и температурного профилемера, для проведения мезомасштабного моделирования параметров атмосферного пограничного слоя. Разработанные вычислительный алгоритм и комплекс компьютерных программ используют алгоритм оптимальной интерполяции. Входными данными для этого программного комплекса являются файлы, содержащие информацию о первом приближении, получаемом с помощью запуска развиваемой в проекте РНФ мезомасштабной модели

TSUNM3 (Tomsk State University Nonhydrostatic Mesoscale Meteorology Model) на выбранный период моделирования без усвоения наблюдений, и файлы с почасовыми измеренными значениями метеорологических параметров в точках расположения измерительных приборов ЦКП «Атмосфера» ИОА СО РАН. В результате выполнения этой программы обработки данных первого приближения и наблюдений получаются файлы анализа (измененные с учетом наблюдений файлы первого приближения) на определенное время, которые могут использоваться в качестве начальных условий или для корректировки результатов промежуточного численного прогноза. Разработан блок модели TSUNM3 по чтению заранее подготовленных файлов анализа и их использованию в модели TSUNM3 при проведении прогностических расчетов на следующие 24 часа.

3. На примере модельной задачи численного решения уравнения переноса было проведено сравнение эффективности применения популярных технологий параллельного программирования OpenMP, MPI (Message Passing Interface) и их комбинации (MPI+OpenMP), а также гибридных подходов CPU+GPU с использованием параллельных технологий OpenACC и CUDA. Численная аппроксимация дифференциальной задачи выполнена методом конечного объема со вторым порядком по времени и пространству. Для обеспечения второго порядка точности по времени используется комбинация неявной схемы Кранка-Николсон для вертикальной диффузии и явной схемы Адамса-Бэшфорда для остальных слагаемых уравнения. При аппроксимации конвективных членов уравнения используются монотонизированные линейные противопотоковые схемы Ван Лира. Неявная аппроксимация для вертикального диффузионного переноса позволяет избежать жесткого ограничения на шаг интегрирования по времени, а результатом приближенного интегрирования является система линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, в которой для вычисления значений сеточной функции можно использовать экономичный метод прогонки вдоль вертикальных сеточных линий. Было получено, что при небольшом объеме передаваемых между программными модулями данных или небольшом количестве решаемых уравнений весьма перспективным является применение параллельных технологий программирования для вычислительных систем с общей памятью. Для численной реализации математических моделей с большим количеством (более десяти) адвективно-диффузионных уравнений и дополнительных алгебраических соотношений, как в случае модели TSUNM3 или развиваемой модели переноса примеси, целесообразно применять технологию Message Passing Interface. Разработана параллельная MPI-программа модели TSUNM3, обеспечивающая эффективность не ниже 80 % при использовании до 576 параллельных процессов суперкомпьютера ТГУ Cyberia, и MPI-программа для модели переноса примеси с эффективностью не ниже 70% при параллельных расчетах до 100 процессов.

4. Выполнены вычислительные эксперименты по моделированию отдельных метеорологических ситуаций 2019-2020 гг., приводящих к ухудшению качества приземного воздуха или опасным явлениям погоды – сильному или слабому ветру, туману. Наблюдения за состоянием атмосферы проводились с помощью приборов

ЦКП «Атмосфера» ИОА СО РАН. Для численных расчетов привлекались разрабатываемые в проекте РНФ мезомасштабные модель численного прогноза погоды TSUNM3 и модель для исследования качества атмосферного воздуха. Качество численного прогноза по этим моделям проверялось с использованием результатов наблюдений и расчетов по моделям WRF и CAMx. Район экспериментов – Томск и его окрестности (территория размером 50×50 км с центром в Томске). Выполнена статистическая интерпретация полученных результатов численного прогноза погоды и опасных явлений погоды и качества атмосферного воздуха, которая показала, что разрабатываемые в проекте модели предсказывают значения приземных метеопараметров и концентраций примеси, а также вертикальных профилей температуры количественно не хуже, чем выбранные для сравнения модели.

5. С использованием оборудования ЦКП «Атмосфера» ИОА СО РАН в 2021 г. были проведены измерения метеорологических параметров в пограничном слое атмосферы в пунктах «IAO» (г. Томск, Академгородок) и «Базовый Экспериментальный Комплекс» («BEC») ИОА СО РАН. В обоих пунктах использовались температурно-ветровые комплексы в составе метеорологического температурного профилемера МТР-5 (измерение профилей температуры), метеорологического акустического локатора (содара) «Волна-4М» (измерение профилей скорости и направления ветра), ультразвуковых анемометров-термометров (ультразвуковых метеостанций – УЗМ) «Метео-2» (измерение метеорологических параметров и характеристик турбулентности в приземном слое). Измерения с помощью метеостанций и профилемеров велись круглосуточно. Кроме того, в пункте «IAO» (TOR-станция ИОА СО РАН) были проведены измерения концентраций аэрозольных частиц с размерами от 0,25 мкм и больше, а также концентраций газовых составляющих атмосферы (CO₂, NO, NO₂, O₃, SO₂, CH₄). При обработке полученных в период 01.01–31.10.2021 экспериментальных данных были выделены эпизоды с продолжительными штилевыми условиями, когда в приземном слое могли накапливаться аэрозольные и газовые примеси, эпизоды (дни) с сильным порывистым ветром в приземном слое. Выполнены работы по выявлению эффекта «городского острова тепла» (ГОТ) путем сравнения профилей температур воздуха на разных высотах между пунктами «IAO» (урбанизированная территория) и «BEC» (естественный ландшафт). Проведено сопоставление сезонной динамики измеренных концентраций аэрозоля (в разных диапазонах размеров) и ряда газов в 2020–2021 годах.

6. Для изучения проблемы загрязнения атмосферного воздуха в районе г. Томск использованы результаты наблюдений ЦКП «Атмосфера» ИОА СО РАН в 2020г., которые содержат измеренные значения основных метеопараметров и концентраций примеси. Был выполнен статистический анализ взаимосвязи между метеорологическими параметрами (давление, влажность, скорость и направление ветра, температура воздуха) и концентрациями загрязняющих веществ (CO, O₃ и PM₁₀) за период с 1 января по 31 октября 2020г. Для оценки взаимосвязи между содержанием примеси и метеорологическими параметрами рассчитывался

коэффициент корреляции и оценивалась его достоверность. В результате получены общие закономерности зависимости приземной концентрации монооксида углерода, озона и РМ10 от рассматриваемых метеорологических величин.

7. Продолжено формирование архива фактических значений метеовеличин и концентраций примеси, а также архива полей численного прогноза погоды и качества воздуха за 2019-2021 гг. Кроме того, для оценки интенсивности выбросов автотранспорта г. Томск организован сбор данных с картографических интернет сервисов, предоставляющих информацию о дорожной обстановке. Для оценки выбросов автотранспорта г. Томск также были разработаны вычислительные технологии для получения информации о интенсивности потока машин (количество машин за единицу времени) с помощью анализа видеопотока с общедоступных вебкамер наблюдения.