

Сведения о выполненных работах в 2020 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 2020 году по проекту были выполнены следующие работы:

1. Была разработана новая эйлера фотохимическая модель переноса примеси. Ее основу составляют нестационарные неоднородные конвективно-диффузионные уравнения для компонент примеси, учитывающие турбулентное рассеяние, влажное осаждение, адвективный перенос и химические реакции между компонентами примеси. Модификация коснулась полуэмпирического механизма образования вторичных газовых и аэрозольных загрязнителей воздуха за счет более детального описания механизма генерации приземного озона. Для учета поступления не только антропогенных загрязнителей воздуха, но и биогенных применялась модель эмиссии газов и аэрозолей из природных источников MEGAN. Модель переноса примеси в режиме «офлайн», т.е. после проведения расчетов по мезомасштабной метеорологической модели, получает вычисленные ежечасные поля ветра, турбулентных характеристик, облачности и осадков. Для проверки достоверности результатов модифицированной фотохимической мезомасштабной модели переноса примеси для условий г. Томск использовались данные измерений приземных метеорологических параметров и концентраций основных загрязнителей воздуха (CO, SO₂, O₃) ЦКП «Атмосфера», а также расчеты по мезомасштабной модели качества атмосферного воздуха CAMx (США). С помощью разработанной модели переноса примеси выполнено численное исследование ухудшения качества приземного воздуха в холодный период года при ясной, морозной, безоблачной погоде.

2. Для численного решения нестационарных трехмерных неоднородных уравнений «конвекции-диффузии», составляющих основу, как модели численного прогноза погоды, так и модели качества атмосферного воздуха, разработан параллельный эффективный численный метод. На гибридной кластерной вычислительной системе проведены вычислительные эксперименты по определению наиболее перспективного использования параллельных вычислительных технологий (MPI, OpenMP, OpenACC и CUDA) для получения эффективных параллельных программ для решения нестационарного трехмерного неоднородного уравнения «конвекции-диффузии». Результаты этих экспериментов использованы при создании параллельной версии развиваемой в ТГУ негидростатической мезомасштабной метеорологической модели высокого разрешения TSUNM3 для прогнозирования опасных погодных явлений и качества атмосферного воздуха над городом.

3. Усовершенствованная мезомасштабная метеорологическая модель TSUNM3 использована в вычислительных экспериментах по моделированию отдельных метеорологических условий в последние годы (наличие «острова тепла» над г. Томск, повышенное загрязнение атмосферы, условия слабого и сильного ветра). Оценка достоверности результатов расчетов модели выполнена путем сравнения с фактическими параметрами, полученными по приборам Центра коллективного пользования «Атмосфера» Института оптики атмосферы СО РАН имени В.Е. Зуева.

4. С использованием приборной базы ЦКП «Атмосфера» ИОА СО РАН проведены одновременные измерения высотно-временных профилей температуры воздуха, скорости и направления ветра в диапазоне высот до 1 км, а также приземных значений метеорологических параметров, характеристик турбулентности, концентраций аэрозоля и ряда газов в двух пунктах наблюдения – на урбанизированной территории и на территории с естественным ландшафтом. Выполнена обработка результатов измерений, включая выбор и анализ эпизодов с сильными порывами ветра и штилевыми условиями в приземном слое, оценку разности температур на разных высотах между пунктами измерения, оценку взаимосвязи концентраций аэрозоля и газов со скоростью и направлением ветра, анализ эпизодов с турбулентным теплообменом в пограничном слое при длительных зимних инверсиях температуры воздуха.

5. В 2020 году продолжено формирование архива методологических данных. Архив был дополнен свежими данными, полученными при проведении измерений приборами ЦКП «Атмосфера», результатами численного прогноза погоды по модели ПЛАВ Гидрометцентра России. Начат сбор данных с автоматизированных метеорологических комплексов АМК-03, а также с публичных интернет ресурсов (<http://www.imeteo70.ru>). Разработано программное обеспечение, которое с минимальными изменениями может быть адаптировано для сбора необходимых данных с различных сайтов сети Интернет. Сбор и хранение всех данных осуществляется на выделенном сервере, на котором предусмотрено резервирование RAID1, а также дополнительное резервное копирование на сетевую систему хранения данных. В целом за 2020 год было собрано более 15 Гб данных, как в бинарном, так и в текстовом формате. Общий размер всех собранных метеорологических данных составляет ~28Гб.

6. При создании семантической модели транспортной системы Томска использовался традиционный метод решения задачи сведения в логической теории. Онтология написана на языке спецификации OWL 2. Фактологическая часть онтологии (A-box) содержит полностью описанные основные дороги города, а также фрагменты дорог, которые пересекаются с ними в местах образования пробок. В 2020 году собрана коллекция графических данных о пробках на территории города Томска в течение 9 месяцев с периодичностью 1 час. Графики коллекции рассматриваются как источник данных о числе автомобилей в пробках, и предполагается их использование для качественной оценки выбросов загрязняющих газов.

В процессе реализации этих работ были получены следующие научные результаты:

1. Новая мезомасштабная фотохимическая модель переноса примеси, которая на основе сокращенного представления химических реакций способна детально предсказывать процесс образования в городской атмосфере приземного озона и аэрозольных частиц при поступлении как антропогенных, так и биогенных загрязнителей воздуха. С помощью этой модели установлено, что при тихой ясной морозной погоде для условий г. Томск основными причинами накопления примеси вблизи поверхности Земли в ночные часы являются слабый ветер в сочетании с устойчивой стратификацией атмосферного пограничного слоя.

2. Проведенные на сервере с общей памятью и гибридной архитектурой вычислительные эксперименты при численном решении одного конвективно-диффузионного уравнения с применением различных технологий параллельного программирования (OpenMP, MPI, OpenACC и CUDA) показали, что наибольшего ускорения вычислений при ограниченном количестве ядер можно достичь при использовании графических процессоров и технологии CUDA или OpenACC. Однако, в случае, если программный код содержит несколько программных модулей с большим объемом передаваемой между ними информации в процессе вычислений, целесообразно использовать технологию Message Passing Interface.

С учетом полученных результатов рабочая версия модели TSUNM3 распараллелена с использованием технологии MPI. Разработанный параллельный алгоритм показал хорошую масштабируемость и высокую эффективность параллельной программы при проведении расчетов по мезомасштабной метеорологической модели для локальной области исследования на различных сетках в течение двух суток моделирования: 50x50x50 узлов; 98x98x50 узлов; 194x194x50 узлов. Во всем диапазоне использованного числа процессов эффективность не падает ниже 50 %. Для сетки 98x98x50 (область исследования - промышленный район, шаг сетки 1-2км) при использовании 144 и 256 процессов получено ускорение 121,5 и 199,6 соответственно (эффективность более 75 %). Для сетки 194x194x50 (административная область, шаг сетки 1-2км) аналогичные показатели 130,6 и 226,4 (эффективность около 90 %).

Также для ускорения получения результатов численного прогноза был произведен переход в рабочей версии программы TSUNM3 на вычисления с одинарной точностью. Это позволило уменьшить компьютерное время на получение численного суточного прогноза на 25 %.

3. В результате вычислений, проведенных с помощью разработанных моделей, получено, что явление городского острова тепла наиболее ярко проявляется при сухой, преимущественно малооблачной или ясной погоде, при слабом ветре и хорошо выраженном суточном ходе температуры воздуха. Положение городского острова тепла смещается относительно центра города по направлению ветра.

В ночное время над городом и расчеты, и наблюдения указывают на наличие в слое до 500 м устойчивой или безразличной стратификации; более интенсивная инверсия наблюдается в самом нижнем слое ночью (20:00–08:00 ч) зимой.

Применение фотохимической мезомасштабной модели для условий города Томск подтвердило взаимосвязь слабого приземного ветра с ухудшением качества приземного воздуха. Показано также, что устойчивая стратификация атмосферы вызывает повышение Индекса загрязнения воздуха.

Рассмотрены метеорологические ситуации со слабым (меньше 1 м/с) или сильным ветром (приводящим к возникновению порывов ветра выше 11 м/с). Показано, что модель TSUNM3 удовлетворительно прогнозирует периоды, когда наблюдается аномальный ветер при наличии тенденции некоторого завышения скорости ветра.

4. Экспериментально с помощью приборов ЦКП «Атмосфера» установлено, что эффект «городского острова тепла» (ГОТ) для сравниваемых пунктов наблюдения распространяется до высоты 200–300 м. Наибольшие разности температур реализовывались в приземном слое, достигая в отдельных случаях 8–10°C и в среднем превышая 2°C. Это характерно для всех сезонов года. Имеется явная зависимость от скорости ветра в приземном слое: хорошо выраженный эффект ГОТ наблюдался только при скорости ветра менее 1–2 м/с, что подтверждает сделанные выводы на предыдущем этапе работы в рамках данного проекта. Комплексный анализ экспериментальных данных позволил выявить и проанализировать случаи, когда долговременные зимние инверсии температуры воздуха ограниченной протяженности в нижнем слое тропосферы полностью перекрывались турбулентным теплообменом без быстрого разрушения этих инверсий. Проанализированы особенности взаимосвязи концентраций аэрозоля и ряда газов в приземном слое урбанизированной территории со скоростью и направлением ветра. Выделены случаи длительных штилей в приземном слое (от 3 часов и более), проведен анализ их сезонной повторяемости для обоих пунктов наблюдения. Выделены и проанализированы случаи с сильными (более 15 м/с) порывами ветра в приземном слое.

5. Разработана семантическая модель транспортной системы города Томск.