

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА ТРЕХСЛОЙНОЙ АРХИТЕКТУРЫ ДЛЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРОГНОЗИРУЕМЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ГОРОДСКОГО ВОЗДУХА ИСТОЧНИКАМИ АНТРОПОГЕННОЙ И БИОГЕННОЙ ЭМИССИИ

А.А. Барт¹, А.В. Старченко¹, А.З. Фазлиев^{1,2}, Д.В. Царьков³

1. Национальный исследовательский Томский государственный университет

2. Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН

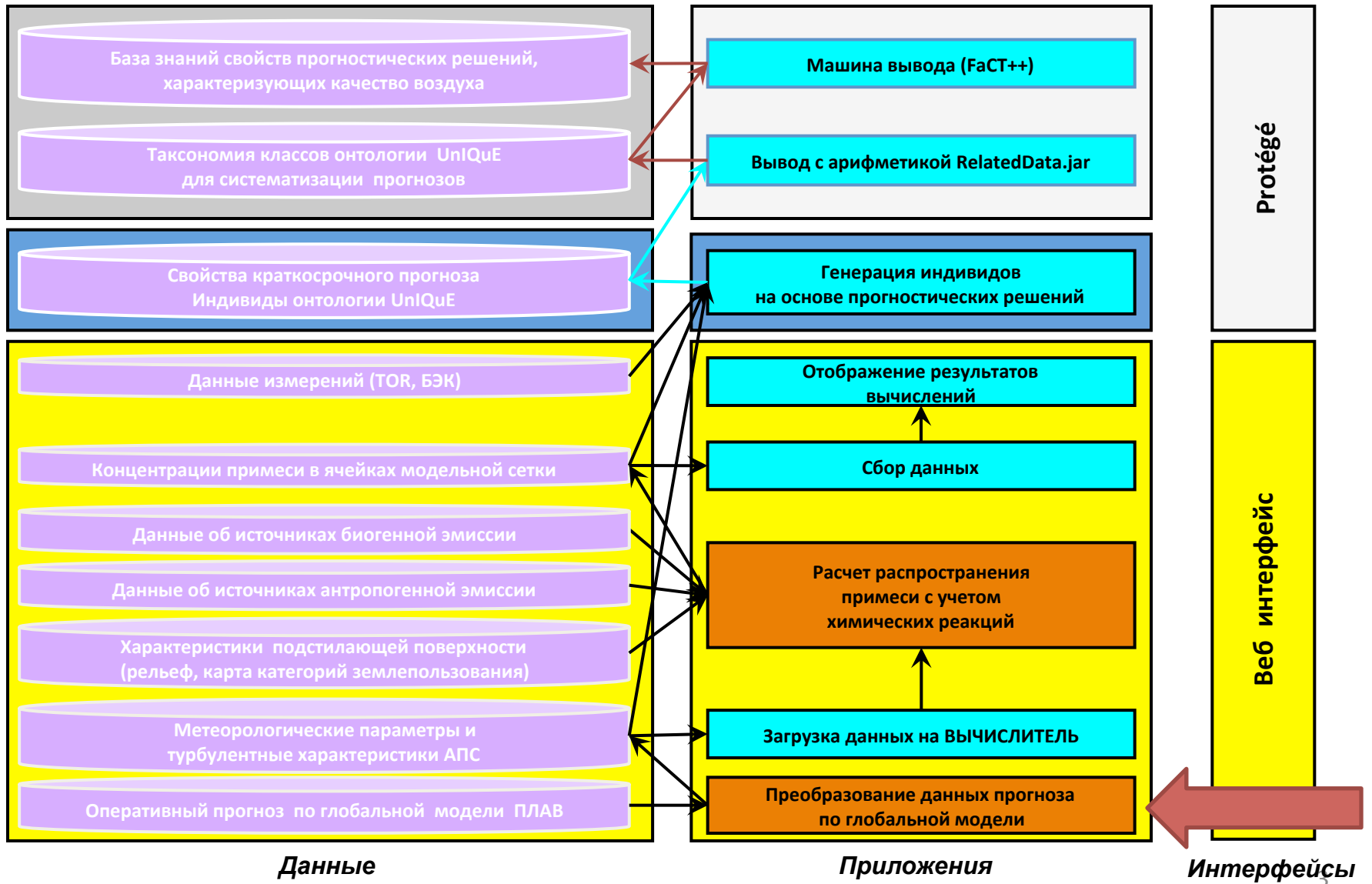
3. School of Computer Science, The University of Manchester, Oxford Road, Manchester,
M13 9PL, UK

bart@math.tsu.ru, starch@math.tsu.ru, faz@iao.ru, tsarkov@cs.man.ac.uk

Актуальность. В настоящее время решение проблемы загрязнения атмосферного воздуха является одной из важнейших задач в экологии. Развитие промышленности вызвало увеличение поступления загрязняющих веществ в атмосферу, что, в свою очередь, непосредственно влияет на здоровье человека. Не всегда имеется возможность установки достаточного количества постов наблюдения за составом воздуха. В таких случаях для анализа и получения численного прогноза качества городского воздуха прибегают к математическому моделированию физических и химических процессов в атмосфере. Математическое моделирование загрязнения атмосферного воздуха стимулировалось тремя процессами. Во-первых, существенно увеличилась вычислительная мощность серверов и компьютерных кластеров. Во-вторых, появились новые эффективные численные методы. В-третьих, активно велась и ведется работа по сбору данных (метеорологических, спутниковых, о промышленных объектах) . Это создало предпосылки для осуществления численных региональных прогнозов качества воздуха.

Цель работы. Основной задачей работы является построение информационно-вычислительной системы (ИВС) трехслойной архитектуры, описывающей химическую погоду в городах.

Информационно-вычислительная система трехслойной архитектуры «UnIQuE»



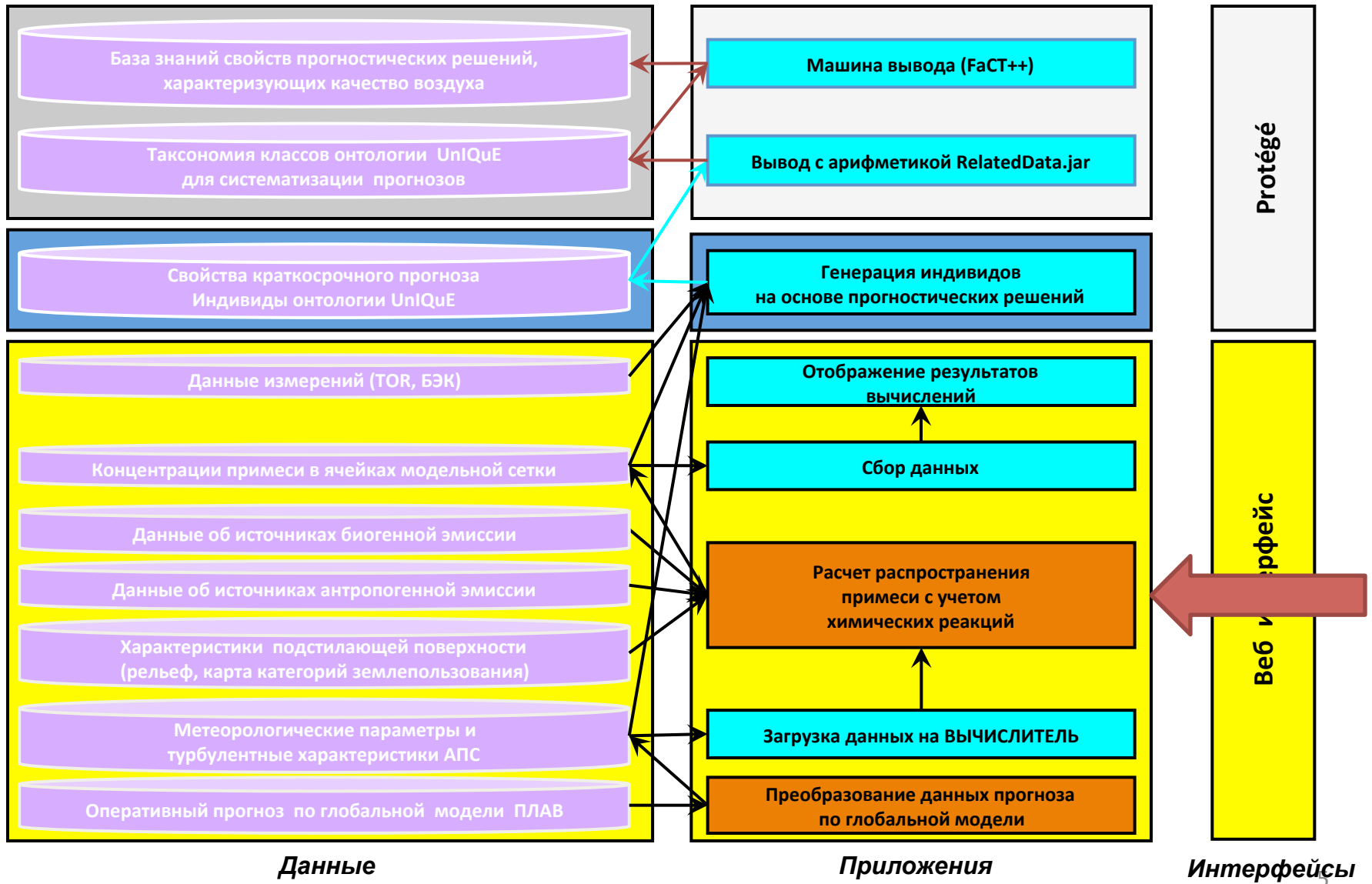
Основные уравнения модели однородного Атмосферного Пограничного Слоя

$$\bullet \frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \langle uw \rangle + f \cdot (V - V_g) + \frac{U_s - U}{\tau_s}; \quad \bullet \frac{\partial V}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \langle vw \rangle - f \cdot (U - U_g) + \frac{V_s - V}{\tau_s};$$

$$\bullet \frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \langle \theta w \rangle + \frac{\Theta_s - \Theta}{\tau_s}; \quad \bullet \frac{\partial Q}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \langle qw \rangle + \frac{Q_s - Q}{\tau_s}.$$

здесь U, V – **горизонтальные компоненты скорости ветра** (вертикальную составляющую считаем пренебрежимо малой W), u, v, w – пульсационные составляющие горизонтальных и вертикальной компонент скорости соответственно, Θ, θ – **средняя** и пульсационная **составляющие потенциальной температуры воздуха**, Q, q – **средняя** и пульсационная **составляющие абсолютной влажности воздуха**, t – время, z – вертикальная координата, U_g, V_g – компоненты скорости геострофического ветра, $f = 2\Omega \sin \varphi$ – параметр Кориолиса, φ – географическая широта рассматриваемой области, Ω – угловая скорость вращения Земли, $\langle uw \rangle, \langle vw \rangle, \langle w\theta \rangle, \langle wq \rangle$ – турбулентные корреляции пульсаций вертикальной составляющей скорости с пульсациями горизонтальных компонент скорости, температуры и влажности, соответственно. τ_s – характерный интервал времени глобальной модели. Индексом «S» обозначены метеорологические поля синоптического масштаба.

Информационно-вычислительная система трехслойной архитектуры «UnIQuE»



Математическая модель загрязнения городского воздуха

Транспортные уравнения :

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial UC_i}{\partial x} + \frac{\partial VC_i}{\partial y} + \frac{\partial WC_i}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial x} \langle c_i u \rangle - \frac{\partial}{\partial y} \langle c_i v \rangle - \frac{\partial}{\partial z} \langle c_i w \rangle - \sigma_i C_i + S_i + R_i; i = 1, \dots, 12$$

Для определения корреляций $\langle c_i u \rangle$, $\langle c_i v \rangle$, $\langle c_i w \rangle$ используются дополнительные замыкающие соотношения в предположении равновесного приближения для дифференциальных уравнений переноса турбулентных потоков массы в условиях локальной однородности атмосферного пограничного слоя. Для их получения требуются значения турбулентных и метеорологических характеристик (Беликов, Старченко 2007).

$$\langle c_i u \rangle = -\frac{\tau}{C_{1\theta}} \left((1 - C_{2\theta}) \langle c_i w \rangle \frac{\partial U}{\partial z} + \langle u^2 \rangle \frac{\partial C_i}{\partial x} + \langle vu \rangle \frac{\partial C_i}{\partial y} + \langle wu \rangle \frac{\partial C_i}{\partial z} \right);$$

$$\langle c_i v \rangle = -\frac{\tau}{C_{1\theta}} \left((1 - C_{2\theta}) \langle c_i w \rangle \frac{\partial V}{\partial z} + \langle uv \rangle \frac{\partial C_i}{\partial x} + \langle v^2 \rangle \frac{\partial C_i}{\partial y} + \langle wv \rangle \frac{\partial C_i}{\partial z} \right);$$

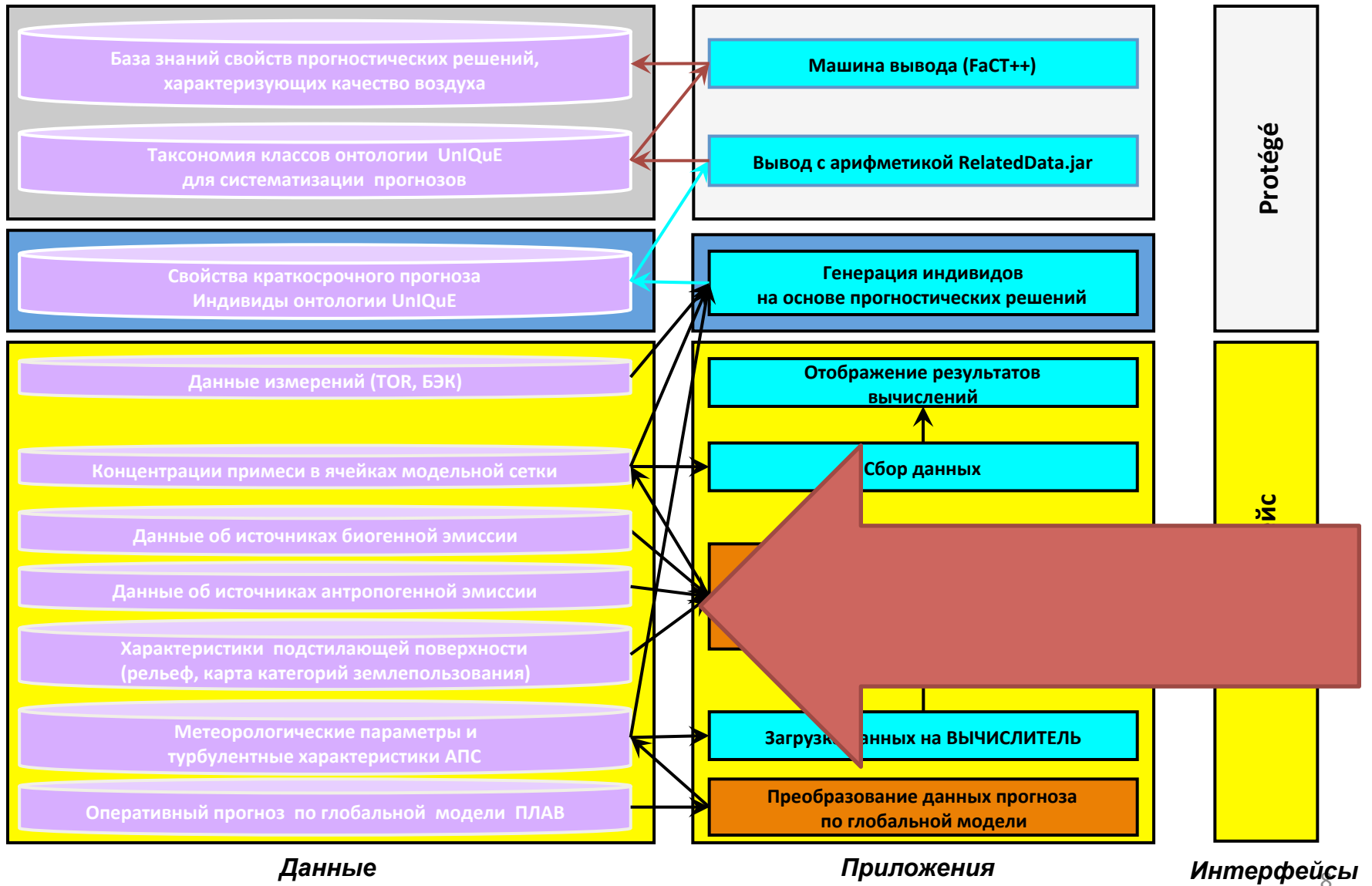
$$\langle c_i w \rangle = -\frac{\tau}{C_{1\theta} + D_{1c} F} \left(-(1 - C_{3\theta}) \frac{g}{\Theta} \langle c_i \theta \rangle + \langle uw \rangle \frac{\partial C_i}{\partial x} + \langle vw \rangle \frac{\partial C_i}{\partial y} + \langle w^2 \rangle \frac{\partial C_i}{\partial z} \right);$$

Химическая модель

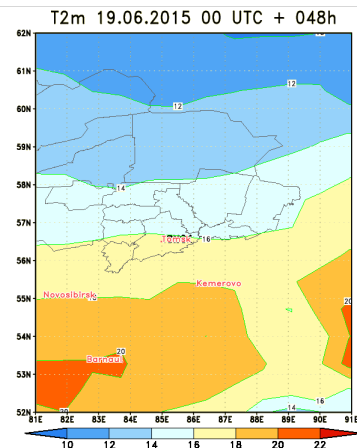
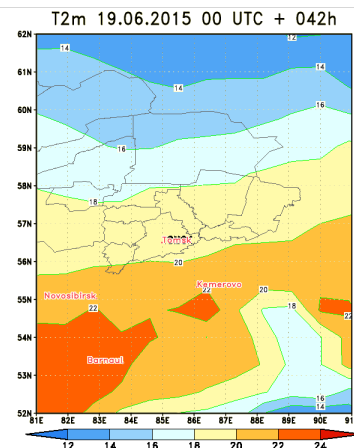
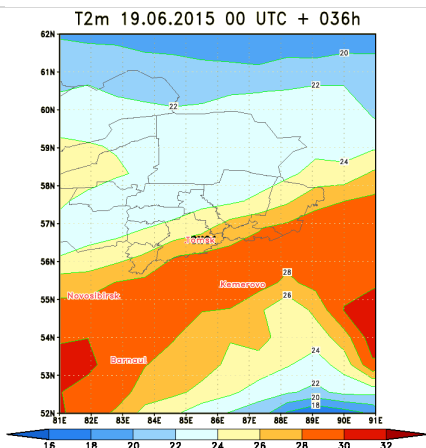
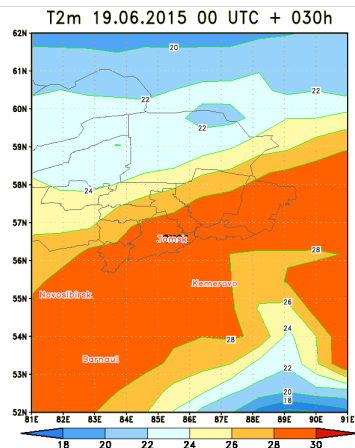
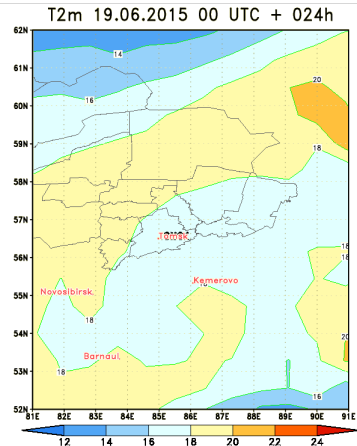
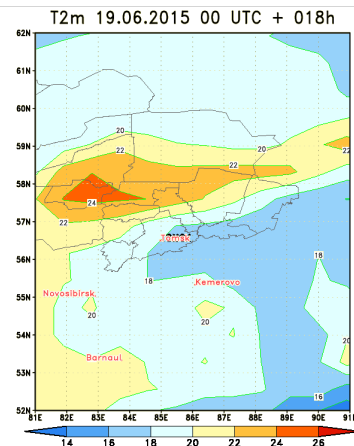
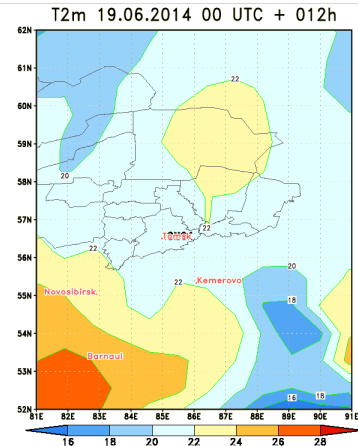
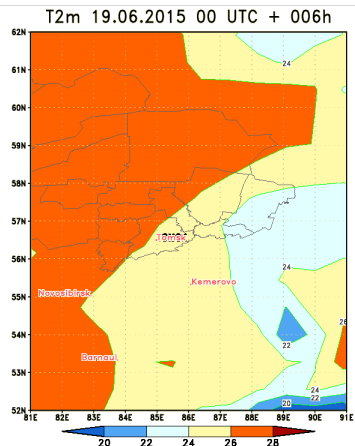
Реакции	Скорости реакций	Реакции	Скорости реакций
Фотолиз		Неорганические реакции	
$NO_2 + hv \rightarrow O(^3P) + NO$	$r_1 = k_1 C_{NO_2}$	$O(^3P) + O_2 \rightarrow O_3$	$r_5 = k_5 C_{O(^3P)} C_{O_2}$
$O_3 + hv \rightarrow O(^1D) + O_2$	$r_2 = k_2 C_{O_3}$	$O(^1D) + N_2 \rightarrow O(^3P) + N_2$	$r_6 = k_6 C_{O(^1D)} C_{N_2}$
$HCHO + hv \rightarrow 2HO_2 + CO$	$r_3 = k_3 C_{HCHO}$	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O(^3P) + O_2$	$r_7 = k_7 C_{O(^1D)} C_{O_2}$
$HCHO + hv \rightarrow H_2 + CO$	$r_4 = k_4 C_{HCHO}$	$O(^1D) + H_2O \rightarrow 2HO$	$r_8 = k_8 C_{O(^1D)} C_{H_2O}$
Органические реакции		$HO_2 + NO \rightarrow NO_2 + HO$	$r_9 = k_9 C_{HO_2} C_{NO}$
$RO_2 + NO \rightarrow NO_2 + HO_2 + HCHO$	$r_{11} = k_{11} C_{RO_2} C_{NO}$	$O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$	$r_{10} = k_{10} C_{O_3} C_{NO}$
$HCHO + HO + O_2 \rightarrow HO_2 + CO + H_2O$	$r_{14} = k_{14} C_{HCHO} C_{HO} C_{O_2}$	$CO + HO \rightarrow HO_2 + CO_2$	$r_{12} = k_{12} C_{CO} C_{HO}$
$RO_2 + HO_2 \rightarrow ROOH + O_2$	$r_{18} = k_{18} C_{RO_2} C_{HO_2}$	$HC + HO \rightarrow RO_2 + H_2O$	$r_{13} = k_{13} C_{HC} C_{HO}$
$RO_2 + RO_2 \rightarrow prod$	$r_{19} = k_{19} C_{RO_2} C_{RO_2}$	$HO + NO_2 \rightarrow HNO_3$	$r_{15} = k_{15} C_{HO} C_{NO_2}$
		$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	$r_{16} = k_{16} C_{HO_2} C_{HO_2}$
		$HO_2 + HO_2 + H_2O \rightarrow H_2O_2 + H_2O + O_2$	$r_{17} = k_{17} C_{HO_2} C_{HO_2} C_{H_2O}$
		$HO + SO_2 \rightarrow H_2SO_4 + HO_2$	$r_{20} = k_{20} C_{HO} C_{SO_2}$

Stockwell W.R., Goliff W.S. Comment on «Simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm» by R. K. Srivastava et al. //J. Geophys. Res., 2002 Vol. 107., pp.4643-4650.

Информационно-вычислительная система трехслойной архитектуры «UnIQuE»



Метеорологический прогноз по глобальной модели ПЛАВ



Область моделирования

Область моделирования представляет собой часть атмосферного пограничного слоя размером 50x50x0,6 км, выбранная таким образом, что горизонтальное основание содержит участок подстилающей поверхности с городом Томск в центре.

голубой - вода

красный - город

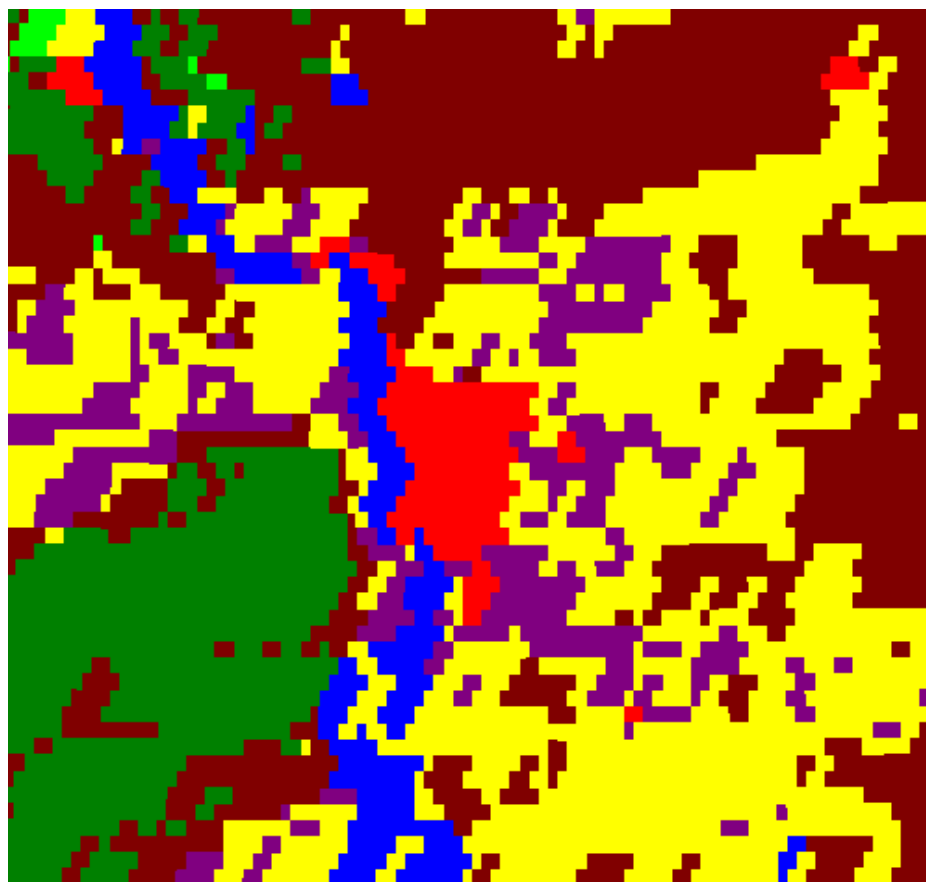
коричневый - смешанный лес

темно зеленый - хвойный лес

светло зеленый - лиственный лес

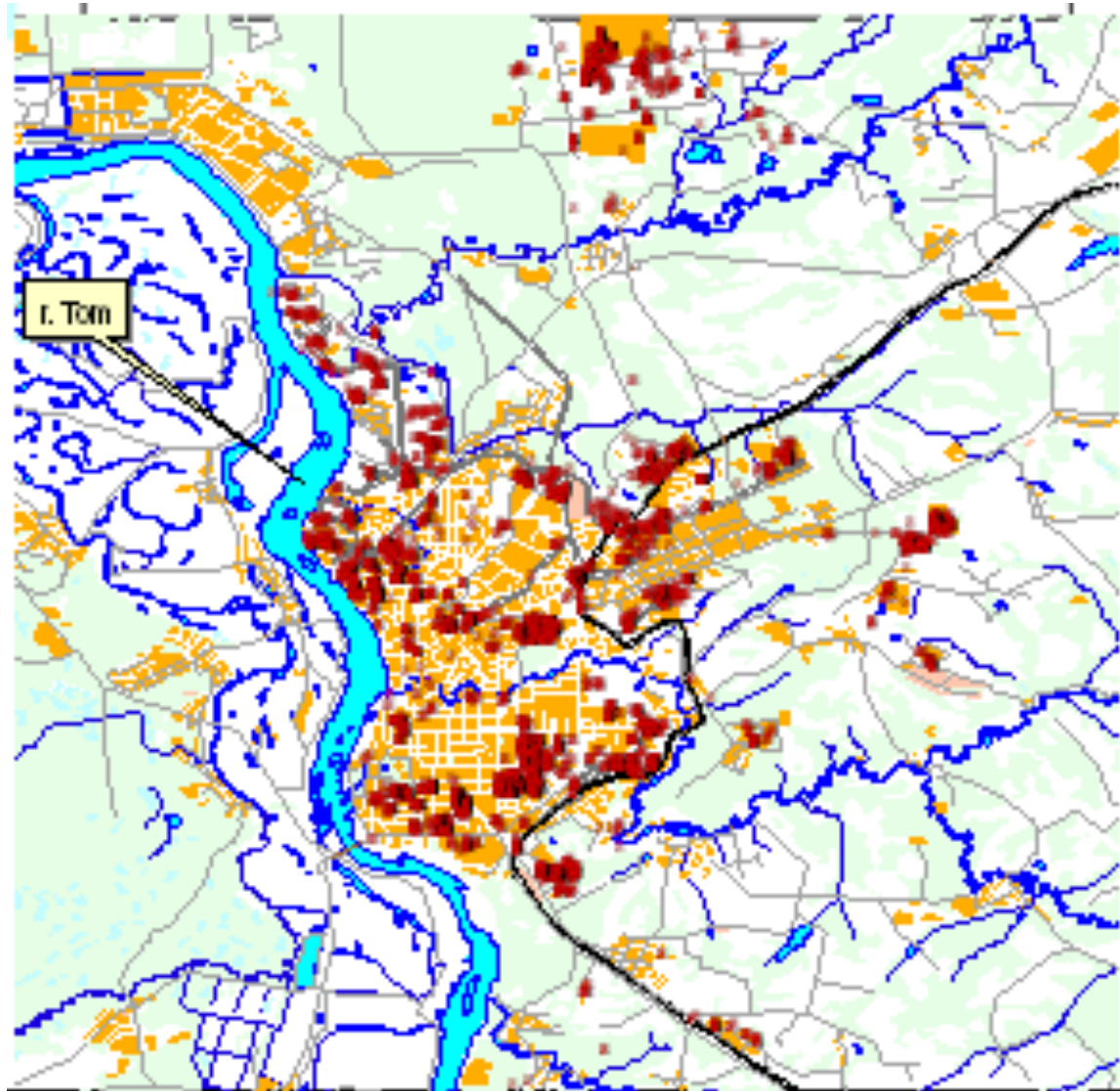
фиолетовый - поля и пастбища

желтый - саванна (высокая трава или злаковые с небольшими участками кустарника или отдельно стоящими деревьями)



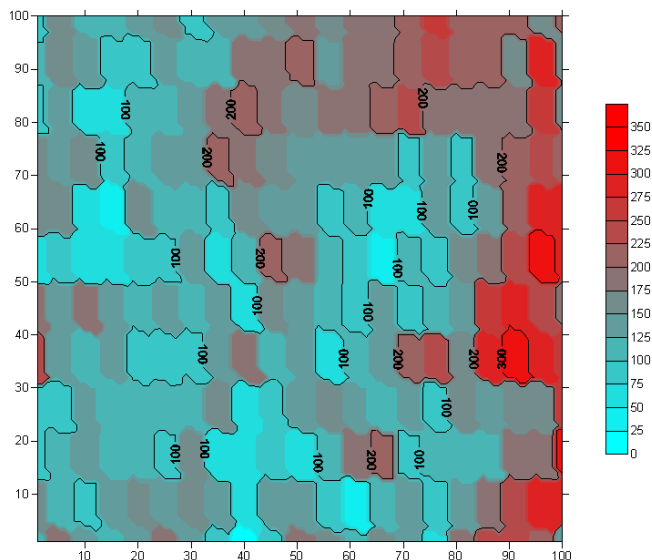
Характеристики подстилающей поверхности в международной классификации (24 категории) Геологической службы Соединенных штатов (USGS)

Данные антропогенной эмиссии

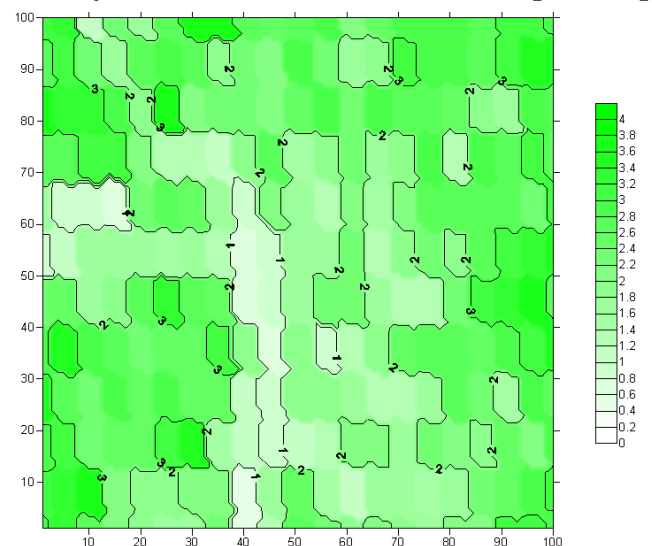


Стационарные источники загрязнения атмосферы в Томске и его окрестностях

Учет поступления изопрена природного происхождения



Isoprene Emission Factor [мкг/с]



Leaf Area Index (Сентябрь)

$$S_{\text{HC}}^{\text{bio}} = \varepsilon * \gamma, \quad \gamma = 0,57 \cdot LAI \cdot \gamma_P \cdot \gamma_T$$

ε - фактор эмиссии, который представляет скорость эмиссии вещества при стандартных условиях

γ - фактор активности эмиссии, учитывающий изменение эмиссии при отклонении от стандартных условий; γ_{LAI} - изменение за счет листовенного покрова, γ_T - изменение за счет температуры, γ_P - изменение за счет *PPFD* (Photosynthetic Photon Flux Density)

$$\gamma_T = E_{opt} \left[\frac{C_{T1} \cdot \exp(C_{T2}x)}{C_{T2} - C_{T1} (1 - \exp(C_{T2}x))} \right], x = \frac{1/T_{opt} - 1/T}{0,00831}, C_{T1} = 95, C_{T2} = 230,$$

$$T_{opt} = 313 + 0,6(T_{24} - 297), E_{opt} = 2,034 \cdot \exp(0,05(T_{24} - 297)) \cdot \exp(0,05(T_{24} - 297)).$$

$$\gamma_P = \begin{cases} 0, & a < 0, a > 180 \\ \sin(a) \cdot \left[2,46 \left(1 + 0,0005 (P_{daily} - 400) \right) \varphi + 0,9\varphi^2 \right], & 0 < a < 180 \end{cases}$$

T_{24} - осредненная за 24 часа температура листовенного покрова

P_{daily} - осредненное значение *PPFD*,

a - угол солнца в градусах,

φ - перенос *PPFD* над растительностью.

A. Guenther, T. Karl, P. Harley, C. Wiedinmyer, P. I. Palmer, and C. Geron. Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (model of emissions of gases and aerosols from nature)//Atmospheric Chemistry and Physics, 6(11):3181-3210, 2006. 12

WEB-интерфейсы вывода результатов

$$ИЗА = \sum_{i=1}^5 \left(\frac{q_i}{ПДК_i} \right)^{c_i}$$

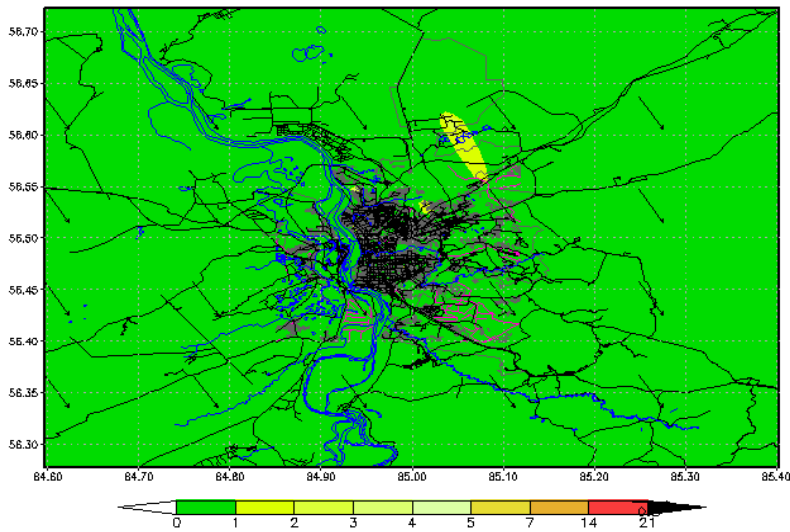
q_i – средняя концентрация i -го вещества;

$ПДК_i$ – среднесуточная предельно допустимая концентрация i -го вещества;

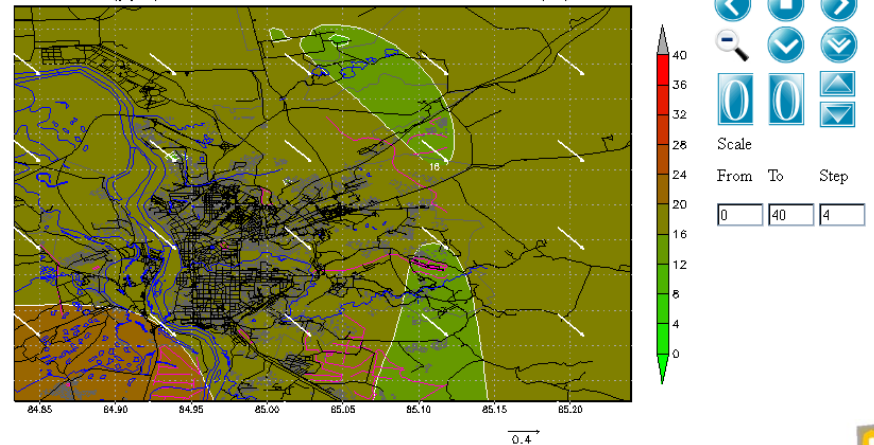
c_i – безразмерная константа приведения степени вредности i -го вещества к вредности диоксида серы, зависящий от того, к какому классу опасности принадлежит загрязняющее вещество.



AQI forecast 0hrs local time

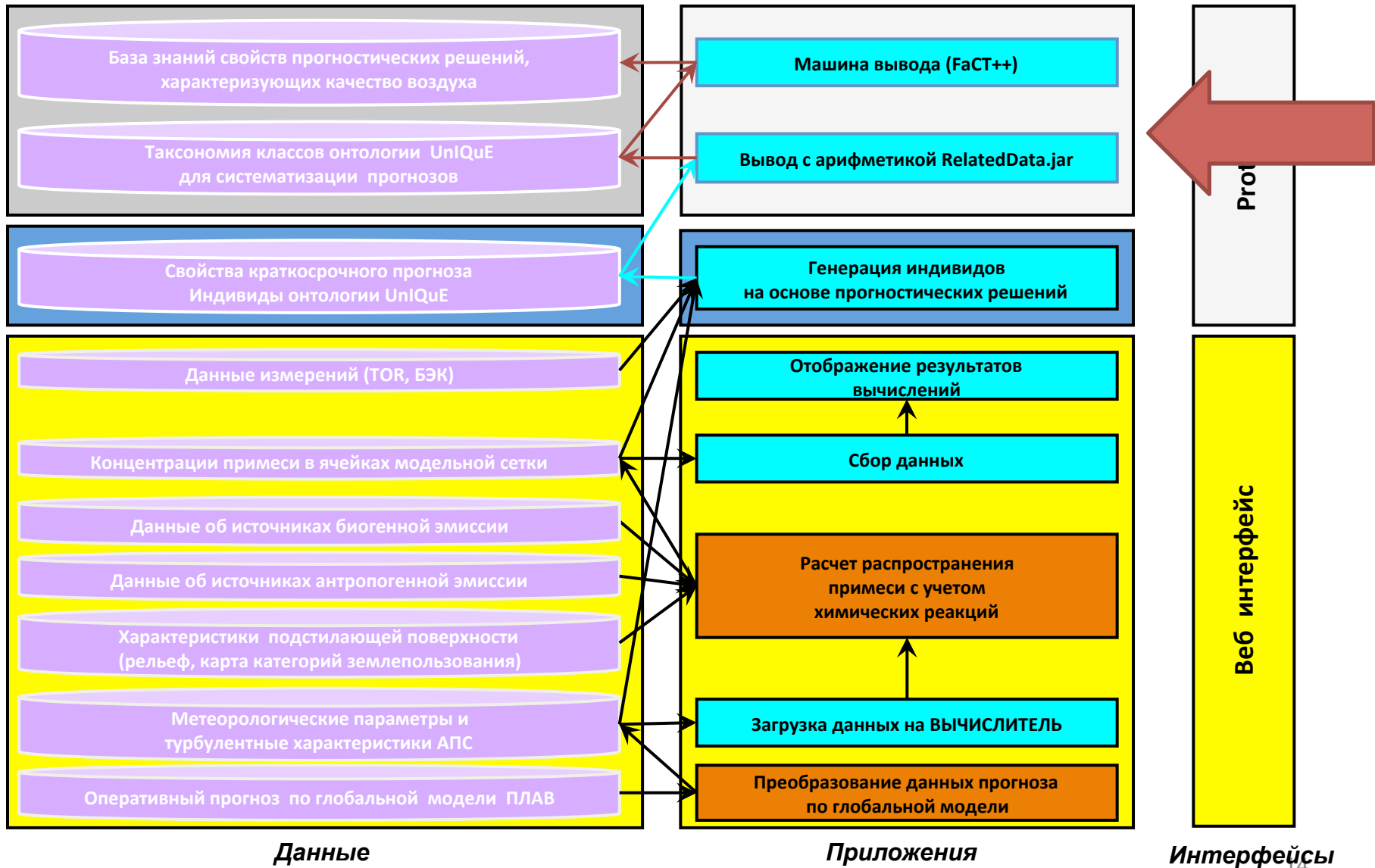


O3 (ppb) forecast 0hrs local time at 10.7143(m)

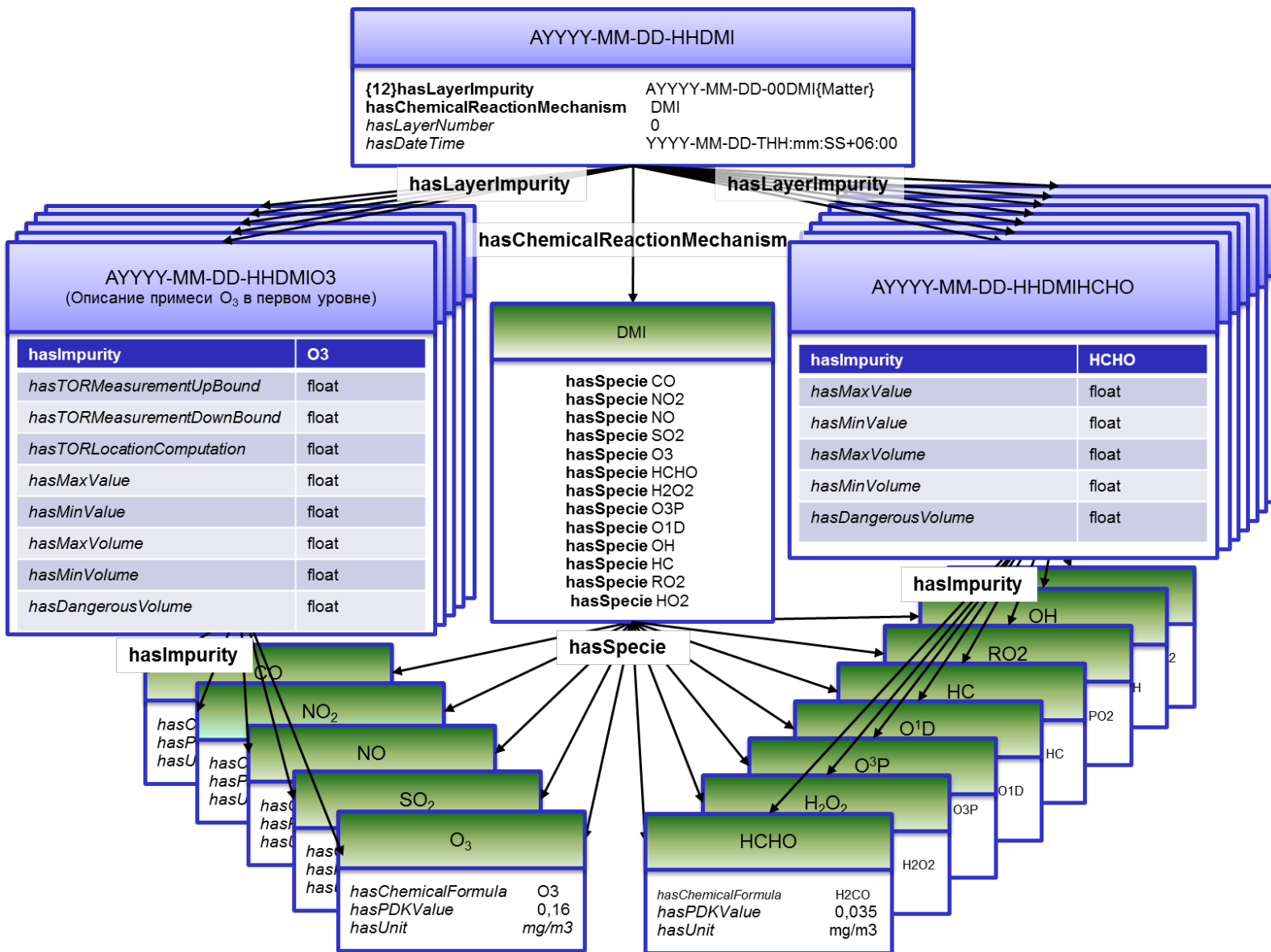


0-5 Низкий
5-7 Повышенный
7-14 Высокий
14-21 Очень высокий

Информационно-вычислительная система трехслойной архитектуры «UnIQuE»

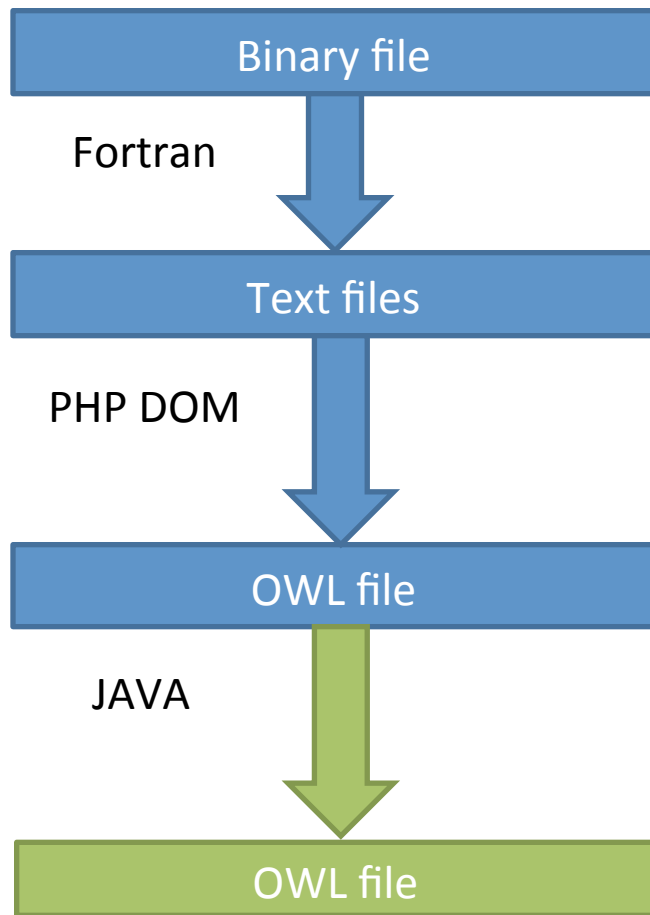


Информационный слой. Структура индивида



Контроль соответствия между измеренными и вычисленными значениями концентраций примесей.

Использование арифметических операций при логическом выводе



Прогностическое решение, содержащее массивы метеопараметров (1D) и концентраций примеси (3D) в приземном слое г.Томска

Построение индивидов онтологии (максимальной и минимальное значения в слое, данные для ТОР-станции) и вычисленные объемы максимального, минимального и превышающего ПДК

Формирование кода онтологии **OWL-UnIQuE** свойств информационных ресурсов по качеству воздуха над Томском

Согласованная онтология **OWL-UnIQuE**, после работы **RelatedData** (отнесения индивидов к классам, содержащим согласованные и несогласованные с измерениями расчетные данные) и **Fact++**.