

# ЧИСЛОВІ МЕТОДИ ТА МОДЕЛІ В ГІДРОМЕТЕОРОЛОГІЇ

**М.В. Савенець**

savenets@uhmi.org.ua

**Л.А. Писаренко**

lolinal@ukr.net

Український гідрометеоро-  
логічний інститут  
ДСНС України та НАН України,  
Київ

УДК 551.509.313

## ОПТИМАЛЬНІ ПАРАМЕТРИ НАЛАШТУВАННЯ ОНЛАЙН-ІНТЕГРОВАНОЇ МОДЕЛІ ENVIRO-HIRLAM ДЛЯ ТЕРИТОРІЇ УКРАЇНИ З МЕТОЮ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ МЕТЕОРОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ТА ХІМІЧНОГО СКЛАДУ АТМОСФЕРИ

*Стаття висвітлює технічний огляд підібраних оптимальних параметрів налаштування та наборів вхідних даних до моделі Enviro-HIRLAM з метою проведення онлайн-інтегрованого моделювання взаємодії метеорологічних процесів та хімічного складу атмосфери над територією України. Продемонстровано параметри доменів для території України, у тому числі даунскейлінгу з метою дослідження впливу урбанізованих районів на атмосферу. Здійснено опис процедури налаштування параметрів моделі з огляду на наявні обчислювальні можливості, а також необхідний набір вхідних даних для початкових та крайових умов. Описано режими запуску моделі залежно від включення схем аерозольних ефектів. Використання наведених параметрів моделі дозволить пришвидшити налаштування та зменшити вартість обчислень за рахунок зменшення кількості тестових запусків.*

**Ключові слова:** моделювання, домен, метеорологічні параметри, хімія атмосфери, аерозольні ефекти

### ВСТУП

Стрімкий розвиток досліджень метеорологічних процесів дозволив виявити численні складні механізми фізико-хімічної взаємодії та зворотних зв'язків у атмосфері. Розширення наукових знань про зворотні зв'язки у так званій системі "клімат — хімічний склад атмосфери — радіаційне перенесення — хмароутворення", а також вивчення нових фізичних закономірностей перебігу атмосферних процесів та їх параметризації на фоні появи потужних обчислювальних систем, призвели до розвитку складного онлайн-інтегрованого моделювання [10, 38]. У т.з. оффлайн моделях перенесення хімічних домішок моделюється на основі попередньо підготовленої або розрахованої вхідної метеорологічної інформації (часто метеорологічними препроцесорами або у вигляді прогностичних метеорологічних даних), і результат розрахунку хімічного перенесення не впливає на метеорологічні параметри наступного часового кроку. На відміну від оффлайн моделей, онлайн-інтегровані моделі забезпечують повну інтеграцію чисельних моделей прогнозу погоди (numerical weather prediction (NWP) model) і моделей хі-

мічного транспорту (atmospheric chemical transport (ACT) model) [9, 17, 28, 31, 36]. На кожному часовому кроці розрахунку рівнянь метеорологічної моделі дані передаються до хімічного блоку, де обчислюється перенесення хімічних складових атмосферного повітря. Результати розрахунку хімічного блоку передаються назад до чисельної метеорологічної моделі, а впливи газових складових, прямих та непрямих аерозольних ефектів у атмосфері на перебіг метеорологічних процесів одразу враховуються, модифікуючи розподіл полів метеорологічних величин. Це забезпечує врахування взаємодії хімічного складу з атмосферними процесами.

Об'єднання NWP та ACT моделей у єдині повністю інтегровані системи дозволили покращити результати дослідження та прогнозування перебігу метеорологічних процесів з урахуванням численних прямих та непрямих аерозольних ефектів [20, 21, 27], перенесення хімічних складових з їх одночасним впливом на фізичний стан атмосфери [11, 22], і складні хімічні трансформації в атмосферному повітрі [10, 12]. На сьогодні, вже розроблено кілька десятків онлайн-інтегрованих моделей, кожна з

яких має свої переваги та недоліки. Найвідомішими з таких моделей є: Weather Research and Forecasting model coupled with Chemistry (WRF-Chem) [17], WRF — The Community Multiscale Air Quality model (WRF-CMAQ) [8], Consortium for Small-scale Modelling model with The Aerosols and Reactive Trace gases extension (COSMO-ART) [36], The Environment — High Resolution Limited Area Model (Enviro-HIRLAM) [36], Integrated Forecasting System — Model for Ozone and Related chemical Tracers (IFS-MOZART) [15], та інші [10, 38].

В Україні використання чисельних метеорологічних моделей [1–6, 19] та моделей хімічного транспорту [16, 23, 26, 34] стає дедалі більш розповсюдженим, займаючи провідну роль у багатьох дослідженнях. У той же час онлайн-інтегроване моделювання використовувалося менше, проте з 2000-х років реалізовано у ряді досліджень та проєктів [18, 29, 32], і продовжує активно залучатися незважаючи на брак достатніх комп'ютерних потужностей та високу вартість подібних підходів. Значний прогрес відбувся на шляху використання онлайн-інтегрованої моделі Enviro-HIRLAM. Активну міжнародну співпрацю у цьому напрямку свого часу було здійснено фахівцями Одеського державного екологічного університету. В останні роки в рамках залучення до наукової програми The Pan-Eurasian Experiment (PEEX) Program [24] та підписанню меморандумів про співпрацю, поряд із Одеським державним екологічним університетом наукову й освітню діяльність з метою використання онлайн-інтегрованого моделювання почали здійснювати Український гідрометеорологічний інститут ДСНС України та НАН України, та кафедра метеорології і кліматології Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Складна взаємодія метеорологічних процесів із хімічними складовими атмосферного повітря на сьогодні залишає відкритими багато питань. Серед них роль тих чи інших ефектів за різних синоптичних умов, сформованих під впливом різних характеристик підстильної поверхні й джерел емісії аерозолів і забруднюючих речовин. Тому, застосування онлайн-інтегрованих моделей має враховувати природні особливості території та налаштовуватися відповідно з урахуванням цих умов. Налаштування моделі потребує проведення тестових запусків. Неправильно підібрані параметри моделі призводять до додаткового тестування моделі, що є вкрай витратним, враховуючи дороговизну онлайн-інтегрованого моделювання.

**Метою даної статті** є представлення та технічний огляд оптимальних параметрів налаштування моделі The Environment — High Resolution Limited

Area Model (Enviro-HIRLAM), включаючи підбір вхідних даних з метою проведення онлайн-інтегрованого моделювання взаємодії метеорологічних процесів та хімічного складу атмосфери над територією України. Результати отримані під час використання моделі Enviro-HIRLAM на суперкомп'ютері Puhti — Bull Sequana фінського центру The CSC — IT Center for Science Computing (Finland) в рамках виконання двох проєктів HPC-Europa 3: HPC17TRLGW “Integrated Modelling for Assessment of Potential Pollution Regional Atmospheric Transport as Result of Accidental Wildfires” (Савенець М.В.) та HPC17ENAVF “Integrated Modelling and Analysis of Influence of Land Cover Changes on Regional Weather Conditions/Patterns” (Писаренко Л.А.).

### МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

В основі моделі Enviro-HIRLAM лежить чисельна метеорологічна модель HIRLAM, що повністю інтегрована з блоками “Enviro”-компонент, які дозволяють моделювати хімічне перенесення, сухе та вологе осадження, хімічні реакції, аерозольні ефекти, тощо [9]. Всі наявні схеми у моделі можна узагальнити у основні групи. Розрахунок радіаційного перенесення реалізовано за схемою Savijarvi [33], яка покращена шляхом включення прямих й непрямих аерозольних ефектів від 10 типів аерозолів. Схема взаємодії підстильної поверхні, біосфери й атмосфери ISBA (Interactionsoil–biosphere–atmosphere and surface scheme) включена до NWPHIRLAM [25]. До фізичних схем належать також схема турбулентності CBR (Cuxart, Bougeault and Redelsperger scheme) [13] та параметризації процесів конвекції й конденсації STRACO (The Soft TRAnsition Condensation cloud scheme) [30] з інтегрованою схемою участі аерозолів у формуванні хмарних крапель [7]. Основні модельні схеми для хімічних процесів включають: мікрофізику аерозолів M7 [35], хімію газів CBM-Z (The Carbon Bond Mechanism ver. Z) [37] та схем хімії сполук сірки у тропосфері [14].

Модель Enviro-HIRLAM було встановлено, налаштовано та використано на суперкомп'ютері Puhti — Bull Sequana фінського центру The CSC — IT Center for Science Computing (Finland) для трьох періодів липень–серпень 2010 р., березень–квітень 2013 р., та квітень 2020 р. Модель налаштовувалась для параметрів та вхідних даних, описаних у результатах даної статті, з метою реалізації двох проєктів, у яких досліджувався вплив змін підстильної поверхні на метеорологічні умови під час екстремальної спеки 2010 року й екстремальних снігопадів 2013 року, а також вплив викидів хімічних складових внаслідок лісових пожеж квітня 2020 року на регіональні атмосферні процеси. Загалом, для виконання

проекту HPC17TRLGW здійснено 56 реалізацій моделі Enviro-HIRLAM кожна для періоду тривалістю близько одного місяця, а для проекту HPC17ENAVF 46 реалізацій для періодів від двох тижнів до одного місяця.

## РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Підбір оптимальних параметрів моделі Enviro-HIRLAM розпочинається із вибору області моделювання (домену). При цьому важливо врахувати атмосферну циркуляцію для періоду моделювання та узгодити із технічними особливостями моделі. У першу чергу, домен має охоплювати значну територію, щоб максимально відслідкувати еволюцію та переміщення повітряних мас, які визначали метеорологічні умови для періоду моделювання. Тому, аналіз синоптичної ситуації є обов'язковим перед вибором розмірів та геометричної форми домену. На *рис. 1* зображено приклад домену з кроком сітки 15 км за умови переважаючого переміщення повітряних мас на територію України з північного заходу. Цей домен має найбільш грубу сітку. У випадку деталізації атмосферних процесів над певною територією, використовується процедура т.з. даунскейлінгу (*англ.*: downscaling). На прикладі *рис. 1*, поряд із доменом із кроком сітки 15 км, зображено домен із кроком 5 км, що охоплює територію України; а також домен із кроком сітки 2 км з центром над м. Київ (якщо, наприклад, метою досліджень є вивчення ефектів урбанізації цього міста).

По-друге, важливо врахувати усі технічні деталі використання моделі Enviro-HIRLAM, серед яких система координат, ширина зони з крайовими ефектами, кількість суб-доменів на які ділиться домен при обчисленнях, і, звичайно, наявні комп'ютерні потужності.

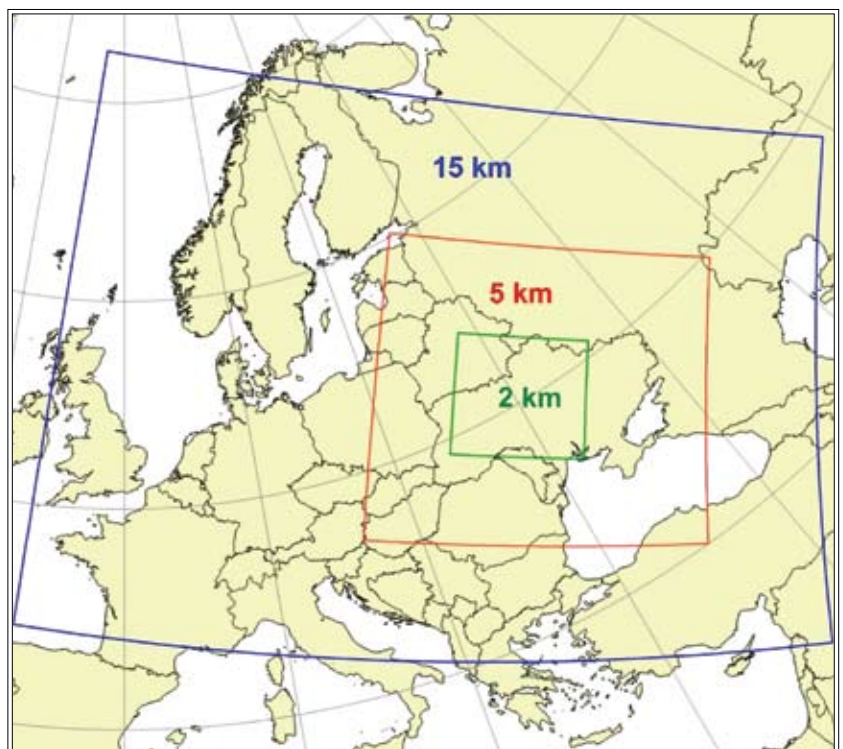
Для моделі Enviro-HIRLAM домен задається у обертовій сферичній системі координат (ОСКК) (*англ.*: rotated spherical coordinate system). Так, домен з північною межею  $-2.131^\circ$ , південною межею  $-37.981^\circ$ , східною межею  $-17.248^\circ$ , західною межею  $-45.598^\circ$ , та положенням Південного полюсу  $0.0^\circ$  за широтою та  $80.0^\circ$  за довготою відповідає домену, зображеному на *рис. 1* з кроком 15 км. Для врахування крайових ефектів встановлено оптимальну ширину зони у 12–14 ґридів, що враховує 4 ґриди т.з. пасивних крайніх

точок (*англ.*: passive boundary points), та 8–10 ґридів т.з. "гало"-зони (*англ.*: halo-zone).

Під час тестування моделі Enviro-HIRLAM встановлено параметри домену для території України з кроком сітки 5 км (*рис. 1*), що не залежить від атмосферної циркуляції врахованої для домену з кроком 15 км. Поряд із тим, на *рис. 1* зображено домен для 2 км, що є найбільш придатним для проведення моделювання над м. Київ. Ця ж область може бути задана і для сітки з кроком 1,5 км. Необхідні числові значення параметрів для наведених на *рис. 1* доменів представлені у *табл. 1*.

З метою встановлення оптимальної чутливості моделі підібрано часовий крок розрахунку (параметр NDTIME у моделі Enviro-HIRLAM). Загалом, часовий крок має врахувати наявні обчислювальні ресурси та заплановані просторові й часові масштаби досліджуваних процесів (зменшення часового кроку дозволяє виявляти більш локальні та короткотривалі метеорологічні процеси). У *табл. 1* наведено три варіанти часового кроку розрахунку моделі Enviro-HIRLAM. Часовий крок для даунскейлінгу залежить від часового кроку розрахунку найбільшого домену. Так, для домену з кроком сітки 15 км обчислення проводились з часовим кроком 240 сек, для домену з сіткою 5 км з часовим кроком 120 сек, і т.д. до найменшого домену.

Особливістю моделі Enviro-HIRLAM є розділення загального домену на суб-домени з метою при-



**Рис. 1.** Основний домен з кроком сітки 15 км та домени для даунскейлінгу з кроком сітки 5 км та 2 км

Таблиця 1. Вхідні параметри для доменів з різним кроком сітки з метою використання у моделі Enviro-HIRLAM для території України

| Назва параметра у моделі | Домен   |         |         |           | Пояснення                               |
|--------------------------|---------|---------|---------|-----------|---|
|                          | 15 км*  | 5 км**  | 2 км*** | 1.5 км*** |   |
| NLON                     | 190     | 310     | 310     | 410       | Кількість ґридів по довготі             |
| NLAT                     | 240     | 310     | 310     | 410       | Кількість ґридів по широті              |
| SOUTH                    | -37.981 | -33.034 | -27.529 | -27.484   | Південна межа (°)у ОССК                 |
| NORTH                    | -2.131  | -17.584 | -21.349 | -21.349   | Північна межа (°)у ОССК                 |
| WEST                     | -45.598 | -39.950 | -35.495 | -35.450   | Західна межа (°)у ОССК                  |
| EAST                     | -17.248 | -24.500 | -29.315 | -29.315   | Східна межа (°)у ОССК                   |
| POLAT                    | 0.0     | 0.0     | 0.0     | 0.0       | Широта Південного полюсу (°)у ОССК      |
| POLON                    | 80.0    | 80.0    | 80.0    | 80.0      | Довгота Південного полюсу (°)у ОССК     |
| NPBPTS                   | 4       | 4       | 4       | 4         | Кількість пасивних крайніх точок        |
| GPHALO                   | 8       | 8       | 8       | 10        | "Гало"-зона                             |
| NBNDRY                   | 12      | 12      | 12      | 14        | Ширина крайової зони (NPBPTS + GPHALO)  |
| NDTIME                   | 180     | 90      | 30      | 30        | Часовий крок розрахунку моделі (секунд) |
|                          | 240     | 120     | 60      | 60        |   |
|                          | 300     | 150     | 90      | 90        |   |

\* — домен у разі переміщення повітряних мас на територію України з північного заходу; \*\* — домен для території України; \*\*\* — домен для дослідження урбанізованих ефектів м. Київ на атмосферу.

швидшення паралельних обчислень, після чого суб-домени "зшиваються" назад у загальний домен. У моделі Enviro-HIRLAM їх кількість задається параметрами з назвою DMINPROCX (кількість суб-доменів по довготі) та DMINPROCY (кількість суб-доменів по широті). Проте, користувач не може задати довільну кількість суб-доменів. Обов'язковою умовою є врахування наявних комп'ютерних можливостей: загальну кількість нодів (DMINODES), що використовується, та кількість завдань, яку можна покласти на одну ноду (DMINTASKS). Так, кількість суб-доменів, що розраховується як  $DMINPROCX * DMINPROCY$  не має перевищувати кількість процесорів (DMINPROC), що розраховується як  $DMINODES * DMINTASKS$ . У табл. 2 наведено оптимальну конфігурацію параметрів для Enviro-HIRLAM при моделюванні на суперкомп'ютері Puhti — Bull Sequana.

Більш того, від наявних комп'ютерних можливостей залежить час обчислень тих чи інших задач під час моделювання. У моделі Enviro-HIRLAM увесь розрахунок складається з великої кількості окремих обчислень для пришвидшення роботи моделі. Максимальний часовий інтервал задається для трьох видів обчислень (див. табл. 2): безпосередньо модельних обчислень (DMICLOCK1), задач з асиміляції даних (DMICLOCK2) та постпроцесингу (DMICLOCK3). Якщо задати занадто короткий інтервал часу, задача може не розрахуватися, що призведе до помилки і зупинки моделі. З іншого боку, якщо задати заве-

лийкий інтервал часу, суперкомп'ютер буде надавати задачі нижчу пріоритетність, що може призвести до перебування задачі у черзі більше часу, ніж потрібно для самого обрахунку (зазвичай, найвищу пріоритетність мають короткотривалі задачі, в результаті чого більш витратні за часом розрахунку будуть призупинятися для швидшого обчислення короткотривалих задач). Тому, перед вдалим запуском моделі на невідомому раніше для користувача суперкомп'ютері, може бути кілька невдалих запусків у зв'язку із невдало вибраним часовим інтервалом.

Для запуску моделі необхідні початкові та крайові умови (англ.: *initial and boundary conditions* (IC/BC)): метеорологічні дані, дані підстильної поверхні, розподіл хімічних складових в атмосфері та джерела викидів забруднюючих речовин [9]. Блок HIRLAM безпосередньо є чисельною метеорологічною моделлю, що розраховує декілька десятків метеорологічних параметрів. Проте для її запуску необхідні початкові умови тривимірних полів абсолютної вологості, характеристик вітру та температури повітря, а також двовимірні поля вологості ґрунту, висоти снігового покриву, альbedo підстильної поверхні, приземного тиску та геопотенціалу. Метеорологічні початкові дані для всіх модельних рівнів Enviro-HIRLAM отримуються з кроком через 3 години з реаналізу ERA 5 наявних в архівах Європейського центру середньострокових прогнозів

Таблиця 2. Вхідні параметри моделі для визначення кількості суб-доменів та константи часу для виконання обчислень на прикладі суперкомп'ютера Puhti — Bull Sequana

| Назва параметра у моделі | Числове значення | Пояснення   |
|--------------------------|------------------|---|
| DMINODES                 | 7                | Загальна кількість нодів                            |
| DMINTASKS                | 40               | Загальна кількість завдань на одну ноду             |
| DMINPROC                 | 280              | Загальна кількість процесорів (DMINODES* DMINTASKS) |
| DMINPROCX                | 17               | Кількість суб-доменів по довготі*                   |
| DMINPROCY                | 15               | Кількість суб-доменів по широті*                    |
| DMICLOCK1                | 3:45:00          | Час для модельних обчислень                         |
| DMICLOCK2                | 2:30:00          | Час для асиміляції даних                            |
| DMICLOCK3                | 1:30:00          | Час для постпроцесингу                              |

\* — має виконуватися умова: DMINPROCX\* DMINPROCY <= DMINPROC.

погоди (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF)) (<https://www.ecmwf.int/en/forecasts/dataset/ecmwf-reanalysis-v5>). За необхідності запуску моделі Enviro-HIRLAM у оперативному режимі з метою прогнозу, метеорологічні IC/BC отримуються з прогностичної моделі ECMWF Integrated Forecasting System (IFS) (<https://www.ecmwf.int/en/publications/ifs-documentation>). Асиміляція даних відбувається із використанням метеорологічних спостережень за кожні 3 години та даних температури поверхні моря (англ.: sea surface temperature (SST)) за кожні 12 годин у форматі BUFR (The Binary Universal Form for the Representation of meteorological data) із архівів ECMWF. Строки IC/BC метеорологічної інформації, необхідної для запуску моделі, представлено у *табл. 3*.

Вхідні дані підстильної поверхні включають типи землекористування, типи ґрунтів, типи вегетації та параметри шорсткості, що у подальшому перераховуються моделлю Enviro-HIRLAM у задані гріди. Використовуються різноманітні бази даних, зокрема ECOCLIMAP-I,II ([https://www.umr-cnrm.fr/gmapdoc/IMG/pdf\\_ECOCLIMAP-SURFEX.pdf](https://www.umr-cnrm.fr/gmapdoc/IMG/pdf_ECOCLIMAP-SURFEX.pdf)), the Pan-European Land Cover Monitoring project (PELCOM) (<https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/figures/pelcom-map>), бази даних The United States Geological Survey (USGS) (<https://www.usgs.gov/>) та інші. Більш того, користувач може задавати власні модифіковані дані підстильної поверхні, що і було здійснено в проєкті HPC17ENAVF "Integrated Modelling and Analysis of Influence of Land Cover Changes on Regional Weather Conditions/Patterns", частина модельних налаштувань з якого представлена у даній статті.

Вивчення взаємодії метеорологічних процесів та хімічного складу атмосфери потребує наявності детальних IC/BC хімічного складу атмосфери. Так, обов'язковими є тривимірні поля аерозольних компонент (пил, гідрофільні та гідрофобні органічний

аерозоль та сажа, сульфатні аерозолі), газових компонент (озон (O<sub>3</sub>), діоксид сірки (SO<sub>2</sub>), діоксид азоту (NO<sub>2</sub>), оксид азоту (NO), пероксид водню (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), гідроксид (OH), нітратний радикал (NO<sub>3</sub>), гідропероксидний радикал (HO<sub>2</sub>), та диметилсульфід (DMS)), що отримують за кожні 3 години із реаналізу Copernicus Atmosphere Monitoring Service (CAMS) (<https://www.ecmwf.int/en/research/climate-reanalysis/cams-reanalysis>). З метою використання Enviro-HIRLAM для прогнозування, IC/BC хімічного складу атмосфери отримуються із даних IFS-MOZART (<https://www.ecmwf.int/en/elibrary/9426-tropospheric-chemistry-integrated-forecasting-system-ecmwf>). Строки IC/BC інформації про хімічний склад атмосфери, необхідної для запуску моделі, представлено у *табл. 3*.

Варто зазначити, що для даунскейлінгу модель Enviro-HIRLAM використовує власний розрахунок з більш грубою сіткою: 15 км для даунскейлінгу на 5 км, а 5 км для даунскейлінгу на 2 км і 1.5 км). Під час даунскейлінгу інформація з ERA-5, CAMS, BUFR та ін. не використовується.

Вхідні дані для викидів забруднюючих речовин отримують із інвентаризацій, що включають антропогенні та природні джерела емісії. Вхідними даними викидів є IS4FIRES (<https://is4fires.fmi.fi>), Evaluating the Climate and Air Quality Impacts

Таблиця 3. Строки вхідної IC/BC інформації необхідні для запуску моделі Enviro-HIRLAM

| Метеорологічні дані     |   |
|-------------------------|---|
| ERA-5/ IFS              | 06, 18 UTC (з прогнозом на 00, 03, 06, 09, 12 годин вперед) |
| BUFR метеорол.          | 00, 03, 06, 09, 12, 15, 18, 21 UTC                          |
| BUFR SST                | 00, 12 UTC  |
| Дані хімічних складових |   |
| CAMS/ IFS-MOZART        | 00, 03, 06, 09, 12, 15, 18, 21 UTC                          |

of Short-Lived Pollutants (IIASA's ECLIPSE, 5<sup>th</sup> version), що містять інформацію про викиди SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, аміак (NH<sub>3</sub>), неметанових летких органічних сполук (nm VOC), сажі, органічного вуглецю (OC), твердих часток з розміром 2,5 мкм та 10 мкм (PM2.5 і PM10), CO, метану (CH<sub>4</sub>) яка представлена за SNAP кодом (Selected Nomenclature for Air Pollution) для відповідних джерел викидів. Загалом, модель Enviro-HIRLAM є досить зручною до використання різних інвентаризацій емісії, в тому числі і з метою задавання джерел викидів модифікованих чи створених користувачами.

Загалом, реалізувати моделювання взаємодії метеорологічних процесів та хімічного складу атмосфери можна у чотирьох режимах роботи з Enviro-HIRLAM. Незалежно від того, які аерозольні ефекти будуть вивчатися, обов'язковим є контрольний запуск моделі (позначаються як CTRL або REF) без жодних аерозольних ефектів (тобто, звичайний запуск чисельної метеорологічної моделі). Контрольний запуск — це та реалізація розрахунку, із якою будуть порівнюватися інші реалізації. Вивчення впливу прямих аерозольних ефектів відбувається шляхом активації константи DAE (від *англ.*: direct aerosol effects) при налаштуванні моделі. У цьому режимі, Enviro-HIRLAM активує усі схеми, відповідальні за розрахунок прямих аерозольних ефектів в атмосфері. Відповідно, активація тільки константи IDAE (від *англ.*: indirect aerosol effects) активує усі схеми відповідальні за розрахунок непрямих аерозольних ефектів. І останній варіант запуску моделі — активація обох схем аерозольних ефектів DAE+IDAE.

## ВИСНОВКИ

У результаті проведеного тестування моделі Enviro-HIRLAM та вдало завершених обчислень для різних періодів і задач, встановлено оптимальні параметри налаштування та набір вхідних даних. Для території України встановлено стандартні межі області моделювання (домену) з кроком сітки 5 км, що рекомендовано використовувати після даунскейлінгу з 15 км. Встановлений 5-ти км домен не залежить від врахування циркуляційних умов, адже

синоптичний аналіз проводиться для встановлення домену з кроком 15 км, що буде варіюватися залежно від поставлених задач. З метою вивчення урбанізованих ефектів на прикладі м. Київ наведено оптимальні параметри доменів з кроком 2 км та 1,5 км. Здійснено налаштування моделі Enviro-HIRLAM з урахуванням наявних обчислювальних потужностей, від яких залежить часовий крок розрахунку моделі, кількість задач та нодів, кількість суб-доменів, на які буде розбито основний домен тощо. Представлено можливі набори даних як вхідної інформації для початкових та крайових умов (метеорологічні характеристики та вміст хімічних складових атмосферного повітря), так і можливі варіанти використання інвентаризацій викидів і характеристик підстильної поверхні. Загалом, модель Enviro-HIRLAM може залучати обчислення прямих, непрямих, та обох (прямі + непрямі) аерозольних ефектів, проте бажаним є наявність контрольного запуску моделі для порівняння. Враховуючи, що онлайн-інтегроване моделювання досі залишається недостатньо реалізованим для території України через брак обчислювальних потужностей, представлені у статті оптимальні вхідні параметри моделі Enviro-HIRLAM дозволятимуть швидше провести налаштування та зменшити кількість попередніх тестових запусків з метою виявлення помилок перед початком моделювання.

## ПОДЯКИ

Робота здійснена в рамках фінансування двох грантів проекту HPC-Europa 3: HPC17TRLGW “Integrated Modelling for Assessment of Potential Pollution Regional Atmospheric Transport as Result of Accidental Wildfires” (2020-2022) та HPC17ENAVF “Integrated Modelling and Analysis of Influence of Land Cover Changes on Regional Weather Conditions/Patterns” (2020-2022). Автори вдячні The CSC — IT Center for Science Computing (Finland) за надання обчислювальних ресурсів, та хосту Alexander Mahura (Institute for Atmospheric and Earth System Research (INAR), University of Helsinki) за наукове консультування.

## ЛІТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Гузий А.М., Ковалец И.В., Кушан А.А., Железняк М.И. Система численного прогноза погоды WRF-Украина. *Мат. машинні системи*. 2008. **4**. 123–131. [Guziy A.M., Kovalets I.V., Kushchan A.A., Zhelezniak M.I. (2008). Numerical weather forecast system WRF-Ukraine. *Math. Machines and Systems*. **4**. 123–131] [In Russian].
2. Дорошенко А.Ю., Шпиг В.М., Кушніренко Р.В. Застосування машинного навчання для уточнення чисельних метеорологічних прогнозів. *Проблеми програмування*. 2020. **2–3**. 375–383. <https://doi.org/10.15407/pp2020.02-03.375>
3. Зазімко Р., Романенко С., Рубан І., Іванов С., Тучковенко Ю., Дерік О. Моделювання з високим розділенням складних вітрових умов над північно-західною частиною Чорного моря. *Український гідрометеорологічний журнал*. 2020. **25**. 5–16. <https://doi.org/10.31481/uhmj.25.2020.01>

- [Zazimko R.V., Romanenko S.E., Ruban I.G., Ivanov S.V., Tuchkovenko Y.S., Derik O.V. (2020). High resolution modelling of severe wind patterns over the north-west Black Sea Region. *Ukrainian Hydrometeorological Journal*. **25**. 5–16] [In Ukrainian].
4. Ивус Г.П., Пишняк Д.В., Шпиг В.М. Оценка восстановления состояния атмосферы при прохождении холодных фронтов в модели WRF-ARW. *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2010. **9**. 92–102. [Ivus G., Pishniak D., Shpyg V. (2010). Estimation of atmosphere state reconstruction in the WRF-ARW model under cold fronts passing. *Visnyk Odes'kogo derzhavnogo universitetu*. **9**. 92–102] [In Russian].
  5. Пірнач Г.М. Чисельне моделювання хмар та опадів у системах атмосферних фронтів. Київ: Ніка-Центр. 2008. 295 с. [Pirnach G. (2008). Numerical modelling of cloudiness and precipitations in atmospheric front systems. Kyiv. Nika-Centr. 295.] [In Ukrainian].
  6. Прусов В.А., Дорошенко А.Ю. Фізичні і математичні моделі, чисельні методи аналізу і прогнозу природних та техногенних процесів в атмосфері. К.: Наукова думка. 2006. 542 с. [Prusov V.A., Doroshenko A.Yu. (2006). Physical and Mathematical Models, numerical methods of analysis and forecast of natural and technogenic processes in the atmosphere. Kyiv. Naukova Dumka. 542] [In Ukrainian].
  7. Abdul-Razzak H., Ghan S.J. (2000). A parameterization of aerosol activation: 2. Multiple aerosol types. *Journal of Geophysical Research*. **105** (D5). 6837–6844. <https://doi.org/10.1029/1999JD901161>
  8. Appel K.W., Bash J.O., Fahey K.M., Foley K.M., Gilliam R.C., Hogrefe C., Hutzell W.T., Kang D., Mathur R., Murphy B.N., Napelenok S.L., Nolte C.G., Pleim J.E., Pouliot G.A., Pye H.O.T., Ran L., Roselle S.J., Sarwar G., Schwede D.B., Sidi F.I., Spero T.L., Wong D.C. (2021). The Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model versions 5.3 and 5.3.1: system updates and evaluation. *Geoscientific Model Development*. **14**. 2867–2897, <https://doi.org/10.5194/gmd-14-2867-2021>
  9. Baklanov A., Korsholm U.S., Nuterman R., Mahura A., Nielsen K.P., Sass B.H., Rasmussen A., Zakey A., Kaas E., Kurganskiy A., Sørensen B., González-Aparicio. (2017). Enviro-HIRLAM online integrated meteorology–chemistry modelling system: strategy, methodology, developments and applications (v7.2). *Geoscientific Model Development*. **10**. 2971–2999. <https://doi.org/10.5194/gmd-10-2971-2017>
  10. Baklanov A., Schlünzen K., Suppan P., Baldasano J., Brunner D., Aksoyoglu S., Carmichael G., Douros J., Flemming J., Forkel R., Galmarini S., Gauss M., Grell G., Hirtl M., Joffre S., Jorba O., Kaas E., Kaasik M., Kallos G., Kong X., Korsholm U., Kurganskiy A., Kushta J., Lohmann U., Mahura A., Manders-Groot A., Maurizi A., Moussiopoulos N., Rao S.T., Savage N., Seigneur C., Sokhi R.S., Solazzo E., Solomos S., Sørensen B., Tsegas G., Vignati E., Vogel B., Zhang Y. (2014). Online coupled regional meteorology chemistry models in Europe: current status and prospects. *Atmospheric Chemistry and Physics*. **14**. 317–398. <https://doi.org/10.5194/acp-14-317-2014>
  11. Baklanov A., Zhang Y. (2020). Advances in air quality modeling and forecasting. *Global Transitions*. **2**. 261–270. <https://doi.org/10.1016/j.glt.2020.11.001>
  12. Carlton A.G., Turpin B.J., Altieri K.E., Seitzinger S.P., Mathur R., Roselle S.J., Weber R.J. (2008). CMAQ model performance enhanced when in-cloud secondary organic aerosol is included: comparisons of organic carbon prediction with measurements. *Environmental Science & Technology*. **42**. 8798–8802. <https://doi.org/10.1021/es801192n>
  13. Cuxart J., Bougeault P., Redelsperger J.-L. (2000). A turbulence scheme allowing for mesoscale and large eddy simulations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. **126**. 1–30. <https://doi.org/10.1002/qj.49712656202>
  14. Feichter J., Kjellström E., Rodhe H., Dentener F., Lelieveldi J., Roelofs G.-J. (1996). Simulation of the tropospheric sulfur cycle in a global climate model. *Atmospheric Environment*. **30**. 1693–1707. [https://doi.org/10.1016/1352-2310\(95\)00394-0](https://doi.org/10.1016/1352-2310(95)00394-0)
  15. Flemming J., Inness A., Flentje H., Huijnen V., Moinat P., Schultz M.G., Stein O. (2009). Coupling global chemistry transport models to ECMWF's integrated forecast system. *Geoscientific Model Development*. **2**. 253–265. <https://doi.org/10.5194/gmd-2-253-2009>
  16. Giaioti D., Oshurok D., Skrynyk O. (2018). The Chernobyl nuclear accident <sup>137</sup>Cs cumulative depositions simulated by means of the CALMET/CALPUFF modelling system. *Atmospheric Pollution Research*. **9**. Is. 3. 502–512. <https://doi.org/10.1016/j.apr.2017.11.007>
  17. Grell G., Peckham S., Schmitz R., Mc Keen S., Frost G., Skamarock W., Eder B. (2005). Fully coupled “online” chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*. **39**. 6957–6975. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.04.027>
  18. Ivanov S., Pavlova H., Palamarchuk J., Ruban I. (2015). Marine aerosols impact on atmospheric characteristics over ocean surface in frontal zones. *Geophysical Research Abstracts*. **17**. 1–12.
  19. Ivanov S., Simmer C., Palamarchuk J., Bachner S. (2008). Estimation of the systematic error of precipitation and humidity in the MM5 model. *Advances in Geosciences*. **16**. 97–107. <https://doi.org/10.5194/adgeo-16-97-2008>.
  20. Jung J., Sourì A.H., Wong D.C., Lee S., Jeon W., Kim J., Choi Y. (2019). The impact of the direct effect of aerosols on meteorology and air quality using aerosol optical depth assimilation during the KORUS-AQ campaign. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*. **124** (14). 8303–8319. <https://doi.org/10.1029/2019JD030641>
  21. Kang J.-Y., Bae S.-Y., Park R.-S., Han J.-Y. (2019). Aerosol Indirect Effects on the Predicted Precipitation in a Global Weather Forecasting Model. *Atmosphere*. **10**. 392. <https://doi.org/10.3390/atmos10070392>
  22. Kim Y., Wu Y., Seigneur C., Roustan Y. (2018). Multi-scale modeling of urban air pollution: development and application of a Street-in-Grid model (v1.0) by coupling MUNICH (v1.0) and Polair3D (v1.8.1). *Geoscientific Model Development*. **11**. 611–629. <https://doi.org/10.5194/gmd-11-611-2018>
  23. Kovalets I.V., Talerko M., Synkevych R., Koval S. (2022). Estimation of Cs-137 emissions during wildfires and dust storm in Chernobyl Exclusion Zone in April 2020 using ensemble iterative source inversion method. *Atmospheric Environment*. **288**. 119305. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2022.119305>
  24. Lappalainen H.K., Kerminen V.-M., Petäjä T., et al. (2016). Pan-Eurasian Experiment (PEEX): towards a holistic understanding of the feedbacks and interactions in the land–atmosphere–ocean–society continuum in the northern Eurasian region. *Atmospheric Chemistry and Physics*. **16**. 14421–14461. <https://doi.org/10.5194/acp-16-14421-2016>
  25. Mahura A., Baklanov A., Petersen C., Sattler K., Amstrup B., Nielsen, N.W. (2006). ISBA Scheme Performance in High Resolution Modelling for Low Winds Conditions. *HIRLAM Newsletter*. **49**. 22–35
  26. Miatselskaya N., Kabashnikov V., Milinevsky G., Chaikovskiy A., Danylevskiy V., Bovchaliuk V. (2016). Atmospheric aerosol distribution in the Belarus-Ukraine region by the GEOS–Chem model and AERONET measurements. *International Journal of*

- Remote Sensing*. **37:14**. 3181–3195. <http://dx.doi.org/10.1080/01431161.2016.1194541>
27. Nguyen G.T., Shimadera H., Sekiguchi A., Matsuo T., Kondo A. (2019). Investigation of aerosol direct effects on meteorology and air quality in East Asia by using an online coupled modeling system. *Atmospheric Environment*. **207**. 182–196. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2019.03.017>
  28. O'Connor F.M., Johnson C.E., Morgenstern O., Abraham N.L., Braesicke P., Dalvi M., Folberth G.A., Sanderson M.G., Telford P.J., Voulgarakis A., Young P.J., Zeng G., Collins W.J., Pyle J.A. (2014). Evaluation of the new UKCA climate-composition model — Part 2: The Troposphere. *Geoscientific Model Development*. **7**. 41–91. <https://doi.org/10.5194/gmd-7-41-2014>
  29. Palamarchuk I., Ivanov S., Ruban I., Pavlova H. (2016). Influence of aerosols on atmospheric variables in the HARMONIE model. *Atmospheric Research*. **169**. 539–546. <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2015.08.001>
  30. Sass B.H. (2002). A research version of the STRACO cloud scheme. Technical Report 02-10. Danish Meteorological Institute, Copenhagen.
  31. Savage N.H., Agnew P., Davis L. S., Ordóñez C., Thorpe R., Johnson C.E., O'Connor F.M., Dalvi M. (2013). Air quality modelling using the Met Office Unified Model (AQUM OS24-26): model description and initial evaluation. *Geoscientific Model Development*. **6**. 353–372. <https://doi.org/10.5194/gmd-6-353-2013>
  32. Savenets M., Pysarenko L., Krakovska S., Mahura A. (2022). Integrated modelling for assessment the influence of aerosol feedbacks on a regional scale as a result of accidental wildfires and land cover changes in Ukraine. EGU General Assembly 2022, Vienna, Austria, 23–27 May 2022. EGU22-4792. <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu22-4792>
  33. Savijärvi H. (1990). Fast Radiation Parameterization Schemes for Mesoscale and Short-Range Forecast Models. *Journal of Applied Meteorology*. **29**. 437–447. [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1990\)029%3C0437:FRPSFM%3E2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1990)029%3C0437:FRPSFM%3E2.0.CO;2)
  34. Turos O.I., Petrosian A.A., Maremukha T.P., Morhulova V.V. (2018). Advantages of the use of risk assessment for the health of the population at the substantiation of the sizes of sanitary-and-protective zones for thermal power objects. *Environment & Health*. **3** (88). 45–49. <https://doi.org/10.32402/dovkil2018.03.045>
  35. Vignati E., Wilson J., Stier P. (2004). M7: An efficient size-resolved aerosol microphysics module for large-scale aerosol transport models. *Journal of Geophysical Research*. **109** (D22). D22202. <https://doi.org/10.1029/2003JD004485>
  36. Vogel B., Vogel H., Bäumer D., Bangert M., Lundgren K., Rinke R., Stanelle T. (2009). The comprehensive model system COSMO-ART—Radiative impact of aerosol on the state of the atmosphere on the regional scale. *Atmospheric Chemistry and Physics*. **9**. 8661–8680. <https://doi.org/10.5194/acp-9-8661-2009>
  37. Zaveri R.A., Peters L.K. (1999). A new lumped structure photochemical mechanism for large-scale applications. *Journal of Geophysical Research*. **104** (D23). 30387–30415. <https://doi.org/10.1029/1999JD900876>
  38. Zhang Y. (2008). Online-coupled meteorology and chemistry models: history, current status, and outlook. *Atmospheric Chemistry and Physics*. **8**. 2895–2932. <https://doi.org/10.5194/acp-8-2895-2008>

## M.V. Savenets, L.A. Pysarenko

Ukrainian Hydrometeorological Institute of SESU and NASU, Kyiv, Ukraine

### THE OPTIMAL SETTINGS FOR THE ONLINE-INTEGRATED MODEL ENVIRO-HIRLAM IN ORDER TO SIMULATE THE ATMOSPHERE-CHEMISTRY INTERACTION FOR THE UKRAINIAN TERRITORY

The necessity of studying complicated feedbacks in the atmosphere and their further implementation in numerical models caused the development of online-integrated modelling. Due to the requirements of huge computer resources, this type of modelling is still not broadly available in Ukraine. The paper presents the analysis of optimal settings and input data towards the use of the online-integrated model Enviro-HIRLAM for the Ukrainian territory. Enviro-HIRLAM could be used to simulate the complicated atmosphere-chemistry interaction and include the role of direct and indirect aerosol effects on the atmospheric processes. Based on the numerous simulations using Enviro-HIR-

LAM while conducting two HPC-Europa3 projects, the optimal settings and input data for the Ukrainian territory were found. It is possible to define standard boundaries for a domain covering the entire Ukrainian territory with 5-km horizontal resolution. This domain does not depend on prevailing synoptic processes because it is used as a downscaling from the 15-km resolution domain, which covers large territories and considers atmospheric circulation. Further downscaling to 2 km and 1.5 km horizontal resolution allows studying the urbanization effects on the atmosphere. The paper describes settings which depend on available computer resources: dynamic time step, number of tasks and nodes, number of sub-domains, etc. We present the possible datasets which could be used for meteorological and atmospheric composition initial and boundary conditions for the Ukrainian territory. Moreover, the possible land-use/land cover datasets and emission inventories are also given. Overall, this setting and input data allow users to run Enviro-HIRLAM using modes which include direct, indirect, or both (direct + indirect) aerosol effects. However, the control run is preferable for result comparison.

**Keywords:** modelling, domain, meteorological parameters, atmospheric chemistry, aerosol effects