

С.А. Солдатенко, А.Ю. Щербаков, Дж. Слоан, Р. Блоксэм, Р.К. Мисра

Моделирование процессов переноса и трансформации примесей в атмосфере на основе системы Models-3

Университет Ватерлоо, Канада

Поступила в редакцию 15.03.2001 г.

Рассмотрены основные особенности информационно-прогностической системы третьего поколения Models-3, разработанной в Агентстве окружающей среды США для решения задач прогнозирования качества атмосферного воздуха. Приведены результаты расчетов, выполненных с помощью этой системы.

Введение

Для описания процессов эволюции примесей в атмосфере разработано достаточно большое количество математических моделей, используемых как в теоретических, так и прикладных исследованиях. Тем не менее вопросы, связанные с созданием математических моделей, имеющих практическую ценность для решения задач прогнозирования качества атмосферного воздуха и его оптических свойств, остаются по-прежнему актуальными. В конце 90-х гг. в Агентстве защиты окружающей среды США была разработана информационно-прогностическая система третьего поколения (система Models-3) как средство поддержки принятия решений в области охраны окружающей среды органами государственного управления [9–13, 17, 18]. Представляется, что данная система на сегодняшний день входит в число наиболее конкурентоспособных в мире.

В настоящей статье излагаются основные особенности системы Models-3 и демонстрируются ее возможности при решении задач прогнозирования качества атмосферного воздуха и его оптических свойств.

Основные компоненты системы

На рис. 1 в общих чертах представлена структура системы Models-3. К числу основных ее компонентов относится метеорологическая моделирующая система, генерирующая метеорологические поля (горизонтальные и вертикальную компоненты вектора скорости, давление, влажность воздуха, характеристики облачности и осадков, потоки тепла, влаги и количества движения, потоки коротковолновой и длинноволновой радиации).

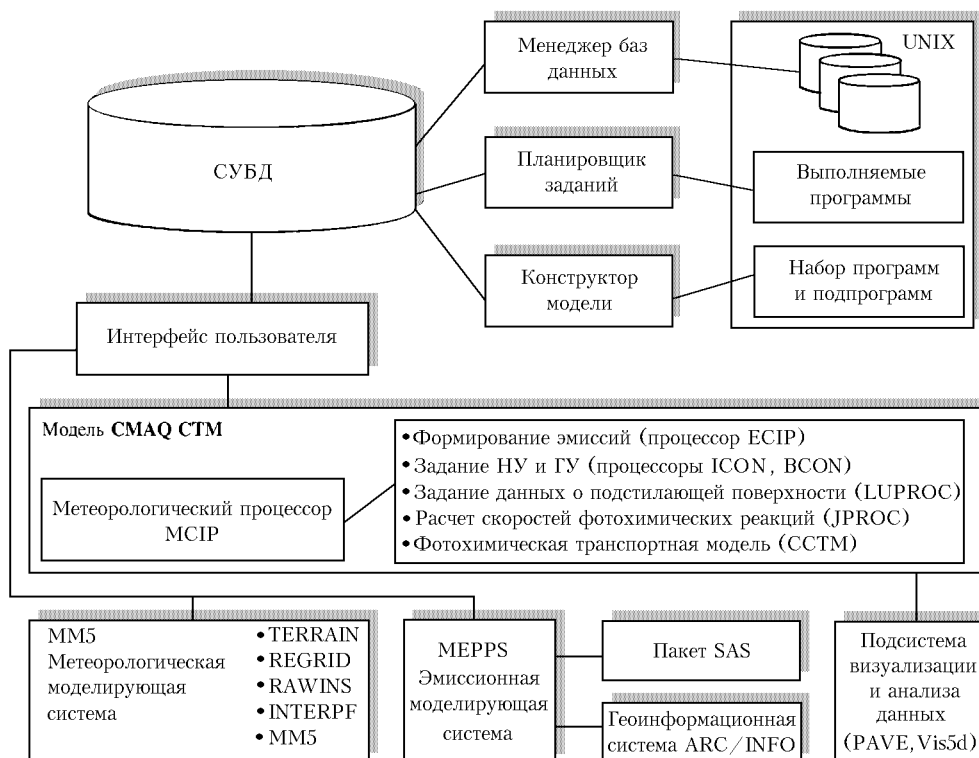


Рис. 1. Структура системы Models-3

Для моделирования (прогнозирования) метеорологических полей используется третья версия системы пятого поколения MM5, созданная в Национальном центре атмосферных исследований (НЦАИ) США в кооперации с университетом штата Пенсильвания [19, 20, 24].

Система MM5 предусматривает негидростатическую динамику и возможность использования схемы четырехмерного усвоения информации при численном прогнозе [29], имеет большое количество схем параметризации подсеточных физических процессов, выбираемых исследователем исходя из поставленной задачи и пространственного масштаба рассматриваемых процессов, позволяет конструировать телескопическую модель (до 9 последовательно вложенных сеток) с односторонним или двухсторонним взаимодействием между сетками. Соотношение величин горизонтальных шагов сеток должно составлять 1:3.

Рассмотрим основные звенья системы MM5 (см. рис. 1). Блок TERRAIN выполняет географическую привязку сеток модели посредством задания горизонтальных размеров (количества узлов) и пространственного разрешения сетки региональной модели, долготы и широты центральной точки региональной сетки, используемой картографической проекции (полярная стереографическая, Ламберта или Меркатора, что делает модель применимой в любых широтах), количества вложенных сеток, их размеров, горизонтального разрешения и положения левого нижнего узла относительно левого нижнего узла сетки более верхнего уровня. Эта подпрограмма служит также для формирования данных о рельефе в типе подстилающей поверхности на основе существующих в системе MM5 баз данных. Для задания рельефа и свойств подстилающей поверхности имеется возможность использовать глобальные топографические данные различного разрешения – от одного градуса до 30 с.

Подпрограмма REGRID предназначена для задания первого приближения метеорологических полей с помощью архивных данных либо данных предшествующего прогноза. В качестве архивных берутся данные реанализа НЦАИ или Европейского центра среднесрочных прогнозов погоды, глобальные данные НЦАИ, прошедшие процедуру усвоения, данные регионального анализа и прогноза. Все вычисления осуществляются для каждой сетки. Файлы, содержащие данные о температуре поверхности океана и сведения о снежном покрове, также формируются в рамках REGRID.

Объективный анализ (ОА) метеорологических полей выполняется в подпрограмме RAWINS, для этого в качестве первого приближения используются данные, полученные в подпрограмме REGRID. Для ОА привлекаются синоптические данные, а также данные о геопотенциале, ветре, температуре и относительной влажности воздуха на следующих изобарических поверхностях: 1000, 850, 700, 500, 400, 300, 250, 200, 150, 100 гПа.

Предусмотрено четыре варианта реализации схемы ОА: схема Крессмана [15], эллиптическая схема [3], ее усовершенствованный вариант (схема «банан» [3]) и схема на основе многомерной квадратичной интерполяции [27]. После ОА данные интерполируются на дополнительные уровни, которые задает исследователь.

Начальные и граничные условия (боковые, нижнее и верхнее) для всех сеток модели формируются в модуле INTERPF. При этом выполняется интерполяция данных с изобарических уровней на σ -поверхности и расштатанную горизонтальную В-сетку. Количество уровней определяет-

ся исследователем. В этом блоке также производится инициализация модели.

Модуль MM5 предназначен собственно для прогнозирования (моделирования) метеорологических процессов. Негидростатическая модель, используемая для этого, позволяет варьировать горизонтальное разрешение от сотен метров до десятков километров. Система уравнений модели записывается в σ -системе координат ($\sigma = (p - p_s)/(p_s - p_s)$) и включает в себя три уравнения движения, уравнение притока тепла, уравнение для прогноза давления, уравнение переноса влажности (здесь мы его не выписываем):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{m}{p} \left(\frac{\partial p'}{\partial x} - \frac{\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} \right) = \\ = -\mathbf{V} \nabla u + v \left(f + u \frac{\partial m}{\partial y} - v \frac{\partial m}{\partial x} \right) - e w \cos \alpha \frac{u w}{r_0} + D_w, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{m}{p} \left(\frac{\partial p'}{\partial y} - \frac{\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} \right) = \\ = -\mathbf{V} \nabla v - u \left(f + u \frac{\partial m}{\partial y} - v \frac{\partial m}{\partial x} \right) + e w \sin \alpha \frac{v w}{r_0} + D_v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\rho_0}{\rho} \frac{g}{p^*} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} + \frac{g}{\gamma p} \frac{p'}{p} = -\mathbf{V} \nabla w + g \frac{\rho_0}{p} \frac{T'}{T_0} - \frac{g R_d}{c_p} \frac{p'}{p} + \\ + e (u \cos \alpha - v \sin \alpha) + \frac{u^2 + v^2}{r_0} + D_w, \\ \frac{\partial T}{\partial t} = -\mathbf{V} \nabla T + \frac{1}{\rho c_p} \left(\frac{\partial p'}{\partial x} + \mathbf{V} \nabla p' - \rho_0 g w \right) + \frac{\dot{Q}}{c_p} + \frac{T_0}{\theta_0} D_0, \\ \frac{\partial p'}{\partial t} - \rho_0 g w + \gamma p \nabla \mathbf{V} = -\mathbf{V} \nabla p' + \frac{\gamma p}{T} \left(\frac{\dot{Q}}{c_p} + \frac{T_0}{\theta_0} D_0 \right). \end{aligned}$$

Адвективный и дивергентный слагаемые имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{V} \nabla A \equiv m u \frac{\partial A}{\partial x} + m v \frac{\partial A}{\partial y} + \dot{\sigma} \frac{\partial A}{\partial \sigma}; \\ \nabla \mathbf{V} = m^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u}{m} \right) - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \sigma} + m^2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{v}{m} \right) - \\ - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial \sigma} - \frac{g \rho_0}{p^*} \frac{\partial w}{\partial \sigma}, \end{aligned}$$

где

$$\dot{\sigma} = -\frac{\rho_0 g}{p} w - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} u - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} v;$$

$$e = 2\Omega \cos \lambda; \lambda - \text{широта}; \alpha = \varphi - \varphi_c$$

(φ – долгота, φ_c – долгота центральной точки сетки); r_0 – средний радиус Земли; \dot{Q} – приток тепла; $p^* = p_s - p_1$. Остальные обозначения общепринятые.

Численное решение уравнений модели выполняется с помощью метода расщепления по физическим процессам. Подсистема, описывающая медленно перемещающиеся волны, интегрируется по схеме центральных разностей [7]. Для решения подсистемы, описывающей перемещение быстрых волн, применяется полуневяный численный алгоритм. В горизонтальной плоскости уравнения модели аппроксимируются со вторым порядком точности на В-сетке Аракавы.

Для задания боковых граничных условий на границах региональной модели используется релаксационная процедура [16]:

$$\left(\frac{\partial \alpha_M}{\partial t} \right)_n = F(n) F_1 (\alpha_{LS} - \alpha_M) - F(n) F_2 \nabla^2 (\alpha_{LS} - \alpha_M),$$

где $F_1 = 0,1/\Delta t$; $F_2 = (\Delta x)^2/50\Delta t$; $F(n)$ – весовая функция, зависящая от номера узла сетки n , отсчитываемого от боковой границы; α_{LS} и α_M – значения рассматриваемой функции по данным глобального моделирования и по данным модели соответственно.

Для вложенных сеток имеется возможность использовать различные варианты постановки боковых граничных условий – постоянные, релаксационная процедура, метод взвешенных тенденций, метод демпфирования поглощением, свободного втока/оттока [16, 24, 28].

В модели имеется достаточно большой набор схем параметризации для описания физических процессов подсеточного масштаба. Для описания конвективных процессов предусмотрено восемь схем параметризации [1, 2, 4, 5, 19, 21, 24, 26, 31], каждая из которых имеет свою область применимости. В случае если горизонтальный масштаб моделируемых процессов составляет 5 км и менее, конвективные процессы не параметризуются, а моделируются явно. Для описания процессов, протекающих в планетарном пограничном слое (ППС) атмосферы, используются шесть схем [6, 8, 24, 32]. Выбор конкретной схемы зависит от количества уровней модели в ППС. При этом имеется возможность расчета температуры и влажности почвы на основе решения одномерных уравнений переноса тепла и влаги в почве [20].

Для расчета лучистых потоков и притоков тепла предусмотрено пять схем параметризации – от простейшей, в которой выхолаживание атмосферы зависит только от температуры, до многоспектральных схем, учитывающих взаимодействие потоков радиации с облаками [24]. Микрофизические процессы и фазовые притоки тепла описываются с помощью восьми схем, которые также имеют различную степень детализации [24].

К основным компонентам Models-3 относится также *эмиссионная моделирующая система* MEPPS, которая служит для расчета эмиссий – мощности и интенсивности источников поступления различных ингредиентов в атмосферу с учетом метеорологических условий и рассматриваемого географического региона. Данная система оперирует с базой данных источников загрязнения, которые подразделяются на точечные, площадные, включая источники биогенного происхождения, и подвижные. При создании этой базы данных для территории Северной Америки Агентство охраны окружающей среды США провело колоссальную работу, связанную с инвентаризацией всех типов источников. Для этого привлекались многочисленные данные Федеральных служб и агентств, агентств и служб отдельных штатов, городов,

предприятий. При инвентаризации подвижных источников за основу были взяты статистические данные о перемещении по дорогам США, Канады и Мексики автомобильной техники различных категорий. Поддерживают подсистему MEPPS геоинформационная система ARC/INFO и прикладной пакет SAS (Statistical Analysis System), с помощью которого выполняется обработка эмиссионных данных и управление всеми звеньями подсистемы MEPPS.

Центральным звеном Models-3 является *подсистема* CMAQ CTM (Community Multiscale Air Quality Chemical Transport Modeling System). С помощью этой подсистемы выполняется подготовка всей необходимой информации, используемой химической транспортной моделью (CTM) для моделирования процессов эволюции загрязняющих веществ и их осаждения с учетом химических превращений, а также осуществляется численное моделирование.

Подсистема CMAQ имеет модульную структуру (см. рис. 1). Модуль LUPROC (land-Use Processor) служит для формирования данных высокого разрешения о характере подстилающей поверхности и их привязки к заданной сетке. Эти данные затем используются в модуле MCIP (Meteorology-Chemistry Interface Processor) для расчета параметров планетарного пограничного слоя атмосферы и скоростей вымывания различных веществ из атмосферы. В модуле MCIP происходит формирование файлов, содержащих данные о метеорологических величинах применительно к сетке химической транспортной модели CTM, а также производится расчет параметров облачности, скоростей сухого и влажного выведения, коэффициентов турбулентного обмена, параметров взаимодействия примесей с подстилающей поверхностью.

Модуль ECIP (Emission-Chemical Interface Processor) генерирует ежечасные трехмерные поля загрязняющих веществ, используя для этого выходные файлы блока MEPPS. В модулях ICON и BCON выполняется формирование начальных и граничных условий для химической транспортной модели. Скорости протекания фотохимических реакций рассчитываются в блоке JPROC с учетом вертикальных профилей коротковолновой солнечной радиации.

Основное уравнение химической транспортной модели записывается в обобщенной координатной системе $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3, \hat{t})$ и имеет вид [9]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\varphi_i J_\xi)}{\partial \hat{t}} + m^2 \nabla_\xi \left(\frac{\varphi_i \hat{V}_\xi J_\xi}{m^2} \right) + \frac{\partial(\varphi_i \hat{u}_3 J_\xi)}{\partial \hat{x}_3} + \\ & + m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^1} \left(\frac{\rho J_\xi}{m^2} \hat{F}_{qi}^1 \right) + m^2 \frac{\partial}{\partial \hat{x}^2} \left(\frac{\rho J_\xi}{m^2} \hat{F}_{qi}^2 \right) + \frac{\partial}{\partial \hat{x}^3} \left(\rho J_\xi \hat{F}_{qi}^3 \right) = \\ & = J_\xi R_{\varphi_i}(\varphi_1, \dots, \varphi_N) + J_\xi Q_{\varphi_i} + \left. \frac{\partial(\varphi_i J_\xi)}{\partial \hat{t}} \right|_{\text{cloud}} + \\ & + \left. \frac{\partial(\varphi_i J_\xi)}{\partial \hat{t}} \right|_{\text{aero}} + \left. \frac{\partial(\varphi_i J_\xi)}{\partial \hat{t}} \right|_{\text{ping}}. \end{aligned}$$

Здесь φ_i – удельная концентрация i -й примеси; J_ξ – яacobian преобразования, зависящий от типа вертикальной координаты (таблица); R_{φ_i} – член, описывающий измене-

ние концентрации i -й примеси за счет химических преобразований; $q_i = \varphi_i / \bar{p}$; Q_{φ_i} – функция, описывающая источники/стоки i -й примеси; $\hat{F}_{q_i}^k$ – турбулентный поток i -й примеси:

$$\hat{F}_{q_i}^1 = m F_{q_i}^1, \quad \hat{F}_{q_i}^2 = m F_{q_i}^y$$

$$\hat{F}_{q_i}^3 = \left(\frac{\partial \hat{x}_3}{\partial x} \right) F_{q_i}^x + \left(\frac{\partial \hat{x}_3}{\partial y} \right) F_{q_i}^y + \left(\frac{\partial \hat{x}_3}{\partial z} \right) F_{q_i}^z.$$

Вертикальная координата	Определение	Вертикальная скорость	Якобиан
z^*		$w = \frac{dz}{dt}$	1
$\sigma_{\bar{z}}$	$\sigma_{\bar{z}} = H \frac{z - z_{\text{stc}}}{H - z_{\text{stc}}}$	$\frac{d\sigma_{\bar{z}}}{dt}$	$\frac{H - z_{\text{stc}}}{H}$
σ_z	$\sigma_z = \frac{z - z_{\text{stc}}}{H - z_{\text{stc}}}$	$\frac{d\sigma_z}{dt}$	$H - z_{\text{stc}}$
$1 - \sigma_{p_0}$	$\sigma_{p_0} = \frac{p_0 - p_T}{p_{\text{os}} - p_T}$	$-\frac{d\sigma_{p_0}}{dt}$	$\frac{p_{\text{os}} - p_T}{p_0 g}$
$1 - \sigma_{\bar{p}}$	$\sigma_{\bar{p}} = \frac{\bar{p} - p_T}{\bar{p}_s - p_T}$	$-\frac{d\sigma_{\bar{p}}}{dt}$	$\frac{\bar{p}_s - p_T}{\bar{p} g}$

* Геометрическая высота.

Последние три слагаемые уравнения модели СТМ описывают соответственно взаимодействие примеси с облаками, генерацию аэрозольного компонента, скорость изменения субстанций за счет диффузии примесей на первоначальном этапе эволюции, когда примесь не «улавливается» сеткой модели.

В системе предусмотрены двенадцать вариантов описания процессов химического взаимодействия газовых компонентов на основе механизмов СВ-IV (Carbon Bond) [23] и RADM (Regional Acid Deposit Model) второй версии [14, 30]. Механизм СВ-IV, который использует система CMAQ, включает в себя 36 газовых компонентов и 93 химические реакции, в том числе 11 фотохимических реакций. Механизм RADM2 описывает 57 газовых компонентов и 158 химических реакций, из которых 21 реакция фотохимическая. При описании химических реакций принимаются во внимание взаимодействие с атмосферной влагой и производство аэрозольной фракции.

Химические процессы в атмосфере описываются системой нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, которые по своим свойствам относятся к «жестким» уравнениям. Для численного решения этой системы используются два алгоритма – неявный, с автоматическим выбором временного шага и контролем ошибки вычисления [22, 25], и явный, который менее точен, чем нелинейный, но тем не менее обеспечивает достаточную точность при меньших вычислительных затратах [17, 18].

Система Models-3 имеет очень удобный и гибкий интерфейс, с помощью которого осуществляются управление процессами подготовки и обработки данных, их визуализация, сборка модели требуемой конфигурации, подготовка задания и т.д. Функция управления данными, мета-данными и программами внутри самой системы возложена на объектно-ориентированную СУБД, которая также осуществляет взаимодействие выполняемых блоков системы Models-3 с учетом проекта, подготовленного исследователем.

Проект (или задание) формулируется с помощью планировщика программ и конструктора модели.

В настоящее время модель СТМ позволяет использовать сетки с горизонтальным разрешением 108, 36, 12 и 4 км, а количество вертикальных уровней – от 6 до 30. Исследователь может по своему усмотрению увеличивать (уменьшать) количество рассматриваемых химических и аэрозольных компонент, добавлять и модифицировать химические и фотохимические реакции.

Результаты численного моделирования

Система Models-3 реализуется на следующих вычислительных платформах – Cray, Sun, SGI, HP, IBM и DEC. Обсуждаемые ниже результаты получены на ЭВМ Sun Ultra 10.

Модель MM5, используемая для численного моделирования, имеет следующую конфигурацию. Размер сетки региональной модели составляет 75×64 узлов (по осям x и y соответственно) с разрешением 108 км. Центральная точка сетки имеет следующие географические координаты: 90° з.д. и 40° с.ш. Применяется картографическая проекция Ламберта. Вложенная сетка имеет размеры 60×56 с шагом 36 км. Количество вертикальных уровней равно тридцати. При такой конфигурации выходной файл модели MM5 имеет размер 12,2 Гбайт/сут.

Конвективные процессы описываются схемой Куо (региональная модель) и Каина – Фритча [26] (вложенная модель). Для параметризации ППС используется схема Блэкадара с высоким разрешением [6]. Облака и осадки параметризуются с помощью схемы, которая на микрофизическом уровне описывает фазовые преобразования и формирует смешанную фазу [19]. Для расчетов лучистых притоков тепла применяется достаточно детальная и сложная схема, учитывающая взаимодействие потоков излучения с облаками [24].

Сетка модели СТМ имеет горизонтальный размер 50×42 с разрешением 36 км. Количество вертикальных уровней равно 30, а верхняя граница модели располагается на уровне тропопаузы.

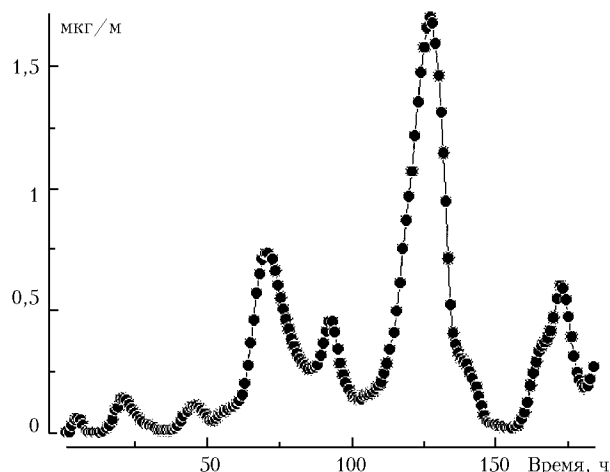


Рис. 2. Временной ход объемной концентрации кумулятивной фракции сульфатного аэрозоля в приземном слое атмосферы (данные осреднены по сетке модели CCTM)

Интегрирование проводилось на 8 сут в период с 8 по 15 июля 1995 г. Эти даты были взяты в связи с тем, что

в это время на территории Северной Америки состоялся наблюдательный эксперимент NARSTO. Данные этого эксперимента могут быть использованы при верификации модели.

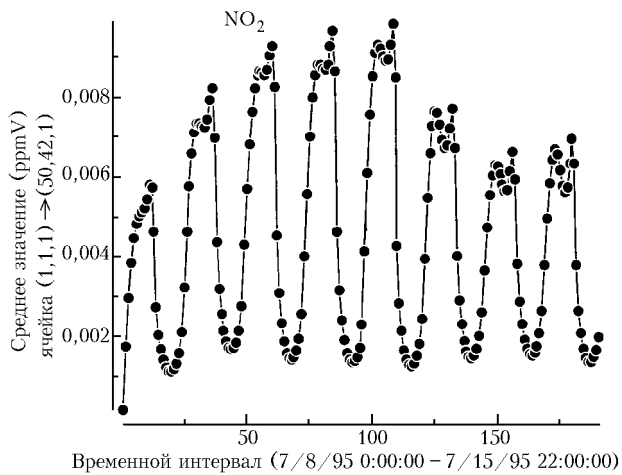


Рис. 3. Временной ход содержания двуокиси азота NO_2 в приземном слое атмосферы (данные осреднены по сетке модели CCTM)

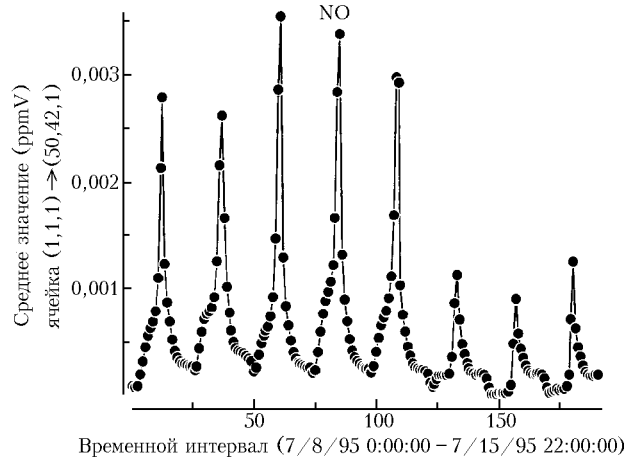


Рис. 4. Временной ход содержания окиси азота NO в приземном слое атмосферы (данные осреднены по сетке модели CCTM)

Приведем некоторые результаты численного моделирования. На рис. 2 показан временной ход объемной концентрации кумулятивной фракции сульфатного аэрозоля в приземном слое атмосферы.

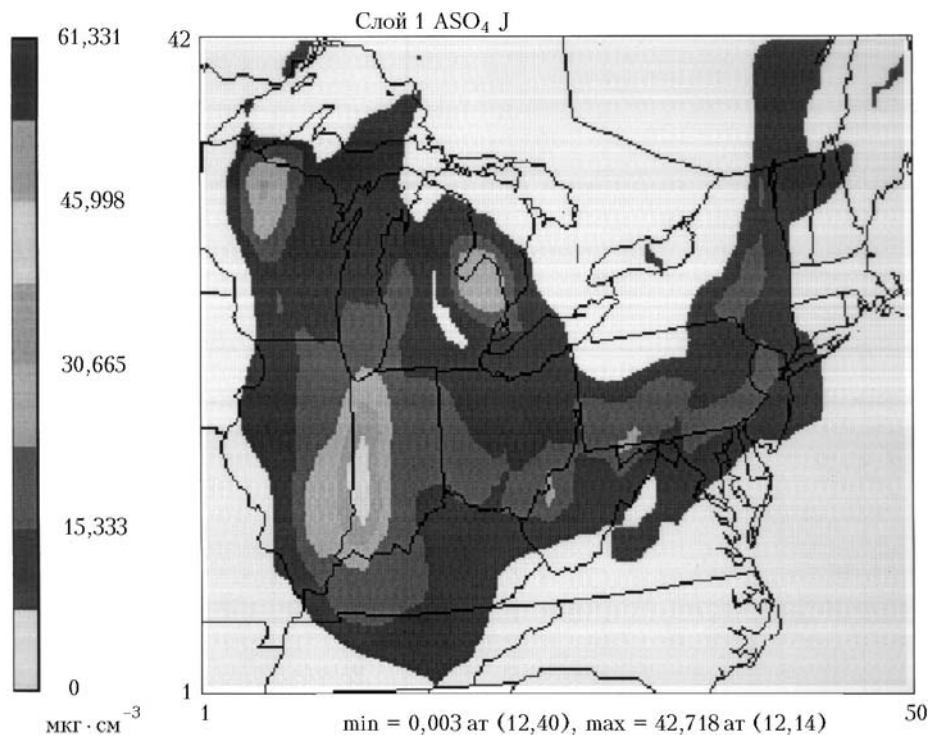


Рис. 5. Пространственное распределение объемной концентрации кумулятивной фракции сульфатного аэрозоля в приземном слое атмосферы на момент времени 09 ч 13 июля 1995 г.

Временной ход содержания окиси и двуокиси азота в приземном слое атмосферы показан на рис. 3 и 4 соответственно. На этих рисунках достаточно отчетливо прослеживается суточный ход загрязнения атмосферы указанными выше ингредиентами.

На рис. 5 показано пространственное распределение в приземном слое атмосферы объемной концентрации кумулятивной фракции сульфатного аэрозоля для момента времени 09 ч 13 июля и 1995 г.

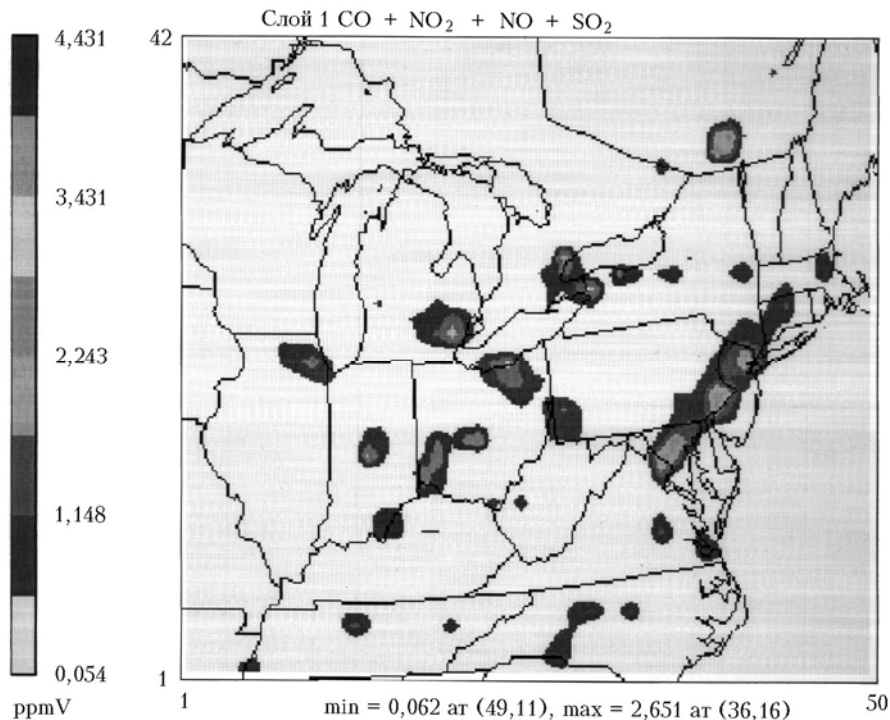


Рис. 6. Пространственное распределение суммарного количества окислов азота (NO_2 , NO), угарного (CO) и сернистого (SO_2) газов в приземном слое атмосферы на момент времени 11 ч 12 июля 1995 г.

Рис. 6 отражает суммарное содержание окислов азота (NO , NO_2), угарного CO и сернистого SO_2 газов для момента времени 11 ч 12 июля 1995 г. На этом рисунке прослеживается четкое соответствие источников загрязнения и моделируемых полей примесей. Оптические свойства атмосферы также могут быть оценены, поскольку в выходном файле модели содержатся сведения о пространственном распределении природного и антропогенного аэрозоля.

Заключение

В настоящее время выполняется тестирование системы, уточняется база данных источников загрязнения атмосферы и осуществляется адаптация моделей применительно к территории Канады. Система Models-3 может быть использована при решении различных задач, связанных с природоохранной деятельностью, в том числе для прогнозирования качества атмосферного воздуха, моделирования последствий техногенных аварий и катастроф, выработки политики в области природоохранной деятельности и т.д.

Данная работа выполнена в тесном сотрудничестве университета Ватерлоо и Министерства окружающей среды провинции Онтарио (Канада) за счет средств упомянутого Министерства.

Метеорологические данные предоставлены НЦАИ, ответственным за поддержку баз данных.

1. Anthes R.A. A cumulus parametrization scheme utilizing a one-dimensional cloud model // *Mon. Wea. Rev.* 1977. V. 106. P. 270–286.
2. Arakawa A., Schubert W.H. Interaction of a cumulus cloud ensemble with the large scale environment. Part I. // *J. Atmos. Sci.* 1974. V. 31. P. 674–701.
3. Benjamin S.G., Seaman N.L. A simple scheme for objective analysis in curved flow // *Mon. Wea. Rev.* 1985. V. 113. P. 1184–1198.
4. Betts A.K. A new convective adjustment scheme. Part I: Observational and theoretical bases // *Quart. J. Roy. Met. Soc.* 1986. V. 112. P. 677–692.
5. Betts A.K., Miller M.J. A new convective adjustment scheme. Part II: Single column tests using GATE wave, BOMEX, ATEX and Arctic air-mass data sets // *Quart. J. Roy. Met. Soc.* 1986. V. 112. P. 693–709.
6. Blakadar A.K. High resolution models of the planetary boundary layer. Part II: in *Environmental Sci. and Engineering*. 1979. No. 1. Plaffin and Ziegel, Eds. Gordon and Breich Sci. Publ., New York. P. 50–85.
7. Bott A. A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes // *Mon. Wea. Rev.* 1989. V. 117. P. 1006–1015.
8. Burk S.D., Thompson W.T. A vertically nested regional numerical prediction model with a second-order closure physics // *Mon. Wea. Rev.* 1989. V. 117. P. 2305–2324.
9. Byun D.W. Dynamically consistent formulations in meteorological and air quality models for multiscale atmospheric approach: I. Governing equations in a generalized coordinate system // *J. Atmos. Sci.* 1999. V. 56. P. 3789–3807.
10. Byun D.W. Dynamically consistent formulations in meteorological and air quality models for multiscale atmospheric approach: II. Mass conservation issues // *J. Atmos. Sci.* 1999. V. 56. P. 3808–3820.
11. Byun D.W. et al. Emerging air quality modeling technologies for high performance computing and communication environment. *Air Pollution Modeling and ITS Application XI* / Ed. S.E. Gryning and F. Schiemeier. 1996. P. 491–502.
12. Byun D.W. et al. Development and implementation of the EPA's Models-3 initial operating version: community multi-scale air quality (CMAQ) model. XXII NATO/CCMS Int. Tech. Meeting on Air Pollution Modeling and Its Application, 2–6 June, 1997. *Air Pollution Modeling and Its Application XII* / Ed. S.E. Gryning and N. Chaumerliac. Plenum Publ. Corp., 1997. P. 357–368.
13. Byun D.W. et al. Description of the Models-3: community multi-scale air quality (CMAQ) model // *Proc. of the Amer. Met. Soc., 78th Annual Meeting*, Phoenix, AZ, Jan. 11–16, 1998. P. 264–268.

14. *Carter W.P.* Condensed atmospheric photooxidation mechanisms for isoprene // *Atmos. Environment*. 1996. V. 24. P. 4275–4290.
15. *Cressman G.P.* An operational objective analysis system // *Mon. Wea. Rev.* 1959. № 87. P. 367–374.
16. *Davies H.C., Turner R.E.* Updating prediction models by dynamical relaxation: an examination of the technique // *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* 1977. V. 103. P. 225–245.
17. *Dennis R.L. et al.* The next generation of integrated air quality modeling: EPA's Models-3 // *Atmosph. Environment*. 1996. V. 30. P. 1925–1938.
18. *Dennis R.L.* The environmental protection agency's third generation air quality modeling system: an overall perspective // *Proc. Amer. Meteorol. Soc., 78th Annual Meeting, Phoenix, AZ, Jan. 11–16, 1998*. P. 255–258.
19. *Dudhia J.* A non hydrostatic version of the Penn State/NCAR mesoscale model: validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front // *Mon. Wea. Rev.* 1993. V. 121. P. 1493–1513.
20. *Dudhia J.* A multi-layer soil temperature model for MM5. Preprints, The Sixth PSU/NCAR Mesoscale Model User's Workshop, Boulder, NCAR. 1996.
21. *Fritsch J.M., Chappel C.F.* Numerical prediction of convectively driven mesoscale pressure systems. Part I: Convective parametrization // *J. Atmos. Sci.* 1980. № 37. P. 1722–1733.
22. *Gear C.W.* The automatic integration of ordinary differential equations // *Comm. ACM*. 1971. V. 14. P. 176–179.
23. *Gery M.W. et al.* A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling // *J. Geophys. Res.* 1989. V. 94. P. 12959.
24. *Grell G.A. et al.* A description of the fifth-generation Penn State/NCAR mesoscale model (MM5). NCAR Tech. Note, NCAR/TN-398+IA. 1993. 122 p.
25. *Jacobson M., Turco R.P.* SMVGEAR: A sparse-matrix, vectorized Gear code for atmospheric modeling // *Atmos. Environment*. 1994. V. 28. P. 273–284.
26. *Kain J.S., Fritsch J.M.* Convective parametrization for mesoscale model: The Kain–Fritsch scheme. The representation of cumulus of mesoscale models / K. Emanuel and D. Raymond, Eds. // *Amer. Met. Soc.* 1993. 246 p.
27. *Nuss W.A., Titley D.W.* Use of multiquadric interpolation in meteorological objective analysis // *Mon. Wea. Rev.* 1994. V. 122. P. 1611–1631.
28. *Perkey D.J., Kreitzberg C.W.* A time-dependent lateral boundary scheme for limited area primitive equation models // *Mon. Wea. Rev.* 1976. V. 104. P. 744–755.
29. *Stauffer D.R., Seaman N.L.* Multiscale four-dimensional data assimilation // *J. Appl. Meteorol.* 1993. V. 33. P. 416–434.
30. *Stockwell W.R. et al.* The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling // *J. Geophys. Res.* 1990. V. 95. P. 16343–16367.
31. *Tao W.-K., Simpson J.* Goddard cumulus ensemble model. Part I: Model description. *Terr. // Atmos. and Ocean Sci.* 1993. V. 4. P. 35–72.
32. *Zhang D.-L., Anthes R.A.* A high-resolution model of the planetary boundary layer // *A. Appl. Met.* 1982. V. 21. P. 1594–1609.

S.A. Soldatenko, A.Yu. Shcherbakov, J. Slown, R. Blocksam, R.C. Misra. **Modeling of impurity transport and transformation in the atmosphere based on models-3 system.**

Main peculiarities of the information-prediction system of the third generation Models-3, designed at the American Environment Agency for the problems of predicting the atmospheric air quality are treated. The calculation results obtained with this system are presented.