

LEVEGŐKÉMIAI MODELLEZÉS AZ ELTE METEOROLÓGIAI TANSZÉKÉN

(Összefoglaló az elmúlt évek kutatásairól)

Mészáros Róbert¹, Leelőssy Ádám¹, Lagzi István László²

1: ELTE Meteorológiai Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

2: BMGE Fizikai Intézet, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

e-mail: mrobi@nimbus.elte.hu

Bevezetés

Az elmúlt években különböző levegőkémiai modellek folyamatos fejlesztését, adaptálását és alkalmazását végeztük az Eötvös Loránd Tudományegyetem Meteorológiai Tanszékén. A szerteágazó munkába alapszakos, mesterszakos hallgatók és doktoranduszok is bekapcsolódtak és hatékonyan segítettek, segítik a levegőkémiai, levegőkörnyezeti kutatásokat. Az egyes modellfejlesztési feladatok gyakran egymásra épülnek, vagy kiegészítik egymást; egy-egy részeredmény alapul szolgálhat a továbblépéshez. A fiktív és valós légszennyezési események szimulációjához, a veszélyhelyzetek esetére készített forgatókönyvek megalapozásához különböző skálájú és szemléletű légszennyezés-terjedési modellekre van szükség. E modellek térbeli (lokálistól kontinentális skáláig) és időbeli (néhány órás időtartamtól évtizedes időtávig történő) alkalmazása rendkívül változatos. A különböző helyzetekre más-más típusú, illetve eltérő tér- és időbeli felbontású modellek jelentik az optimális megoldást. Az alábbiakban a levegőkémiai modellezés területén az elmúlt évtized alatt végzett munkánk során alkalmazott eszközöket, módszereket és az általuk nyert eredményeket foglaljuk össze.

Modellek és szimulációk

Kutatásainkhoz részben szabadon hozzáférhető, nyílt forráskódú diszperziós modelleket adaptáltunk, de a szimulációk nagy része saját fejlesztésű modellekkel történt. A modellfejlesztés előnye, hogy a modell megfelelően „formázható” az adott feladatra, az egyes parametrizációk könnyen kezelhetők, illetve módosíthatók, a bemenő adatbázisok rugalmasan kezelhetők, a modellt már eleve a rendelkezésre álló adatbázisokhoz igazíthatjuk, egyszerűen beilleszthetők a legújabb kutatási eredmények, a fejlesztés során felmerülő problémák és feladatok megoldása pedig jelentősen segíti a témakör alapos megértését. A modellek fejlesztéséhez azonban a már meglévő modellek alkalmazása során nyert tapasztalatok is elengedhetetlenek.

Felhasznált nyílt forráskódú modellek:

ALOHA

Lokális skálán (10 km-en belül) alkalmazható modell pontforrásból származó szennyezőanyagok terjedésének szimulációjára. Az ALOHA (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) az amerikai NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration) és EPA (Environmental Protection Agency) által közösen fejlesztett Gauss-típusú terjedési modell, egyszerű kezelőfelülettel, és rendkívül rövid futási idővel (<http://www2.epa.gov/comeo/aloha-software>). Pontbeli meteorológiai adatokat felhasználva (homogén és stacionárius helyzetet feltételezve), a kibocsátás helyét és mértékét megadva eredményként a szennyezőanyag koncentráció mezőt kapjuk a forrástól számított 10 km sugarú körben.

Az ALOHA modellt alapvetően egyedi szimulációkra tervezték, ezért a nagyszámú szimuláció gyors elvégzése érdekében a modellfuttatást először automatizálni kellett. Az automatikus futásnak köszönhetően statisztikai becsléseket tudtunk végezni a hosszútávú terhelések meghatározása céljából a Fukushimai Atomerőmű (Leelőssy et al., 2011) és a Paksi Atomerőmű (Mészáros et al., 2012) térségére.

HYSPLIT

Nagyobb skálán alkalmazható trajektória modell. A HYSPLIT (HYbrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trejectory) modellt az Amerikai Óceán- és Légkörkutató Intézet Légköri Kutatólaboratóriuma (NOAA ARL) egyes pontforrásból származó szennyezőanyagok terjedésének leírására fejlesztette ki. A modell forward (időben előrehaladó) és backward (időben visszafelé haladó) módban is alkalmazható. Előbbi esetben a légszennyező anyag várható térbeli mozgását tudjuk meghatározni, utóbbi esetben pedig egy adott pontba érkező trajektóriákat tudunk megadni, amiből a kibocsátó forrásra lehet következtetni. A modell és a futtatásához szükséges meteorológiai adatbázis nyilvánosan elérhető a NOAA honlapján (<http://ready.arl.noaa.gov/HYSPLIT.php>).

A HYSPLIT modell eredményeit részben a saját fejlesztésű modellek összehasonlítására használtuk, de a modellel szimulációkat végeztünk a 2011-ben a budapesti Izotóp Intézet telephelyéről kibocsátott rendkívül kis mennyiségű radioaktív jódtól izotóp terjedésének szimulációjára is (Kovács et al., 2012).

OpenFOAM

Lokális skálán, bonyolult geometriájú környezetben, az épületek és egyéb tereptárgyak áramlásmódosító hatásának figyelembe vételére elterjedten alkalmazzák a hidro-termodinamikai egyenletrendszer különböző formáinak közelítő megoldásán alapuló általános célú áramlásmodellező (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) modelleket. Az OpenFOAM is egy ilyen nyílt forráskódú megoldó (<http://www.openfoam.org/features/turbulence.php>), ami a véges térfogat módszerével oldja meg az egyenleteket. A modellezés első lépése az ehhez szükséges megoldási rács létrehozása, amely tartalmazza a vizsgált struktúra geometriáját, kijelöli a határfelületeket, valamint a megadott felbontással cellákra osztja fel a modellteret. A meteorológiai adatok modellbe történő bevitele a kezdeti- és peremfeltételeken keresztül történik. Az alkalmazott numerikus megoldó az összenyomhatatlan, stacionárius, sűrűlódásos és turbulens áramlásra vonatkozó hidro-termodinamikai egyenletrendszert oldja meg. A modellel épületek közötti terjedési viszonyokat és az ennek hatására kialakuló koncentráció mezőket tudjuk meghatározni.

A modell alkalmazása során részletesen vizsgáltuk a horizontális és vertikális felbontás hatását az eredményre és szimulációkat végeztünk a Paksi Atomerőmű üzemi területére, horizontálisan 10 m-es felbontást alkalmazva (Leelőssy et al., 2012).

WRF-Chem

A WRF-Chem a WRF (Weather Research and Forecast) időjárás előrejelzési modell (<http://www.wrf-model.org/index.php>) levegőkémiai folyamatokat is szimuláló kiegészítése. A nyílt forráskódú modell folyamatos fejlesztését a NOAA/ESRL (*National Oceanic and Atmospheric Administration / Earth System Research Laboratory*) koordinálja. Az online csatolású kémiai modell lehetőséget biztosít a levegőkémiai folyamatok modellezésére a mikrofizikai folyamatok leírásától regionális skálákig. A különböző antropogén és biogén emissziós mezők alapján, illetve egyedileg beállítható kibocsátási adatokkal az időjárás

előrejelzési modellt adatait felhasználva a WRF-Chem a légköri szennyezőanyagok terjedését szimulálja Euler-i szemléletmódban.

A modellel első lépésben a Szaharából Magyarország területére érkező por terjedését szimuláltuk (Kovács, 2015). Tovább lépésként a modellel városi pontforrásból származó légszennyezők terjedését elemezzük.

Saját fejlesztésű modellek:

TREX (EULER)

A saját fejlesztésű TREX (TRansport-EXchange) modellcsalád Euler szemléletű, regionális skálájú modellje. A modell a terjedés leírásához használt légköri transzportegyenletekben az advekciót, a függőleges és vízszintes diffúziót, az ülepedést, a kémiai reakciókat és az emissziót figyelembe véve számítja a koncentráció mezőket egy előre definiált rácshálózaton. Emellett a kiülepedés mértéke is becsülhető. A számításokhoz a meteorológiai állapotjelzők modell-rácspontokra interpolált értékeire és a felszínre vonatkozó adatokra van szükség. A modell eseti és folyamatos kibocsátások hatásának vizsgálatára egyaránt alkalmazható.

A TREX Euler modellel Közép-Európa térségére végeztünk szimulációkat. A modellt alkalmassá tettük az ALADIN előrejelzési modell output mezőinek felhasználására és a Paksi Atomerőműben fiktív baleseti kibocsátásokat feltételezve a modell érzékenységét vizsgáltuk (Mészáros et al., 2010), valamint egy esetlegesen bekövetkező baleset hatását elemeztük egy adott év minden napjára statisztikai eloszlásokat megadva (Mészáros et al., 2012a). A modellel több pontforrásból származó, nem radioaktív légszennyezők terjedését is szimuláltuk (Mészáros et al., 2012a).

TREX (LAGRANGE)

A TREX modellcsalád Lagrange-féle részecskemodellje, ami egyedi részecskék mozgását írja le. A szennyezőanyag terjedés hatására kialakuló koncentráció mezők és az ülepedés is becsülhető, de ehhez nagyszámú futtatást kell végezni. Ha kellően nagyszámú részecske trajektóriáját számítjuk, akkor ezek együttese alapján következtethetünk a koncentráció mezőre. A részecskék számának növelése pontosítja az eredményt, de nagyban növeli a futási időt is, ezért e két tényezőt egyszerre szem előtt tartva kell az optimális megoldást választanunk. A modellben a rendszer időbeli változását közönséges differenciál-egyenletrendszer írja le. A terjedés leírásához az advekció determinisztikus értéke mellett a szélirány fluktuáció és a turbulens diffúzió sztochasztikus hatását vesszük figyelembe. A modellel pontforrásból származó szennyezők kis távolságú terjedését szimuláltuk, mert a forrás közelében a Lagrange-féle szemléletmód pontosabban adja vissza a nagy gradienseket, mint az Euler modellek.

A TREX Lagrange modellel a Paksi Atomerőmű 30 km sugarú környezetére végeztünk számításokat. A modellszimulációk gyorsítása érdekében a modellt grafikus processzoron párhuzamosítottuk, ami jelentősen lecsökkentette a számítási időt. A párhuzamosítással – az alkalmazott processzor függvényében – akár 100-szoros gyorsulás is elérhető (Molnár et al., 2010; 2011).

PyTREX (LAGRANGE)

A TREX Lagrange modell további fejlesztéseként magasszintű programozási nyelven (Python) készített modell, ami szennyezőanyagok globális és kontinentális skálájú terjedésének szimulációjára alkalmazható. Felépítése lehetővé teszi, hogy kisszámú trajektória

indításával gyors eredményeket kapjunk a csóva terjedésének irányáról és a koncentráció értékekről egy üzemi balesetet vagy természeti katasztrófát követően. Forrásazonosítás céljából a trajektóriák visszakövetése is elvégezhető időben visszafelé haladva; az ebből kapott eredmények viszont a kibocsátás helyéről csak egy valószínűségi adatot adnak. A PyTREX a GFS időjárás-előrejelző modell által előállított értékeket használja fel bemeneti paramétereként, grib formátumú fájlokat használva.

A PyTREX modellel néhány esettanulmány után egy 2013-ban történt franciaországi üzemi balesetet szimuláltunk. 2013. január 21-én a roueni Lubrizol gyárból merkaptán gáz szabadult ki, ami az erősen változó időjárási helyzetben (360 fokos szélfordulás egy napon belül) különböző irányokban is tapasztalható volt, amit a PyTREX modell jól visszaadott (Leelőssy et al., 2013).

PyTREX (GAUSS)

Nagyszámú modellfuttatást igénylő (pl. statisztikai szimulációk) elvégzéséhez lokális skálán a mai napig alkalmaznak Gauss-típusú modelleket, hiszen ezek a modellek a rendkívül gyors futási idejük miatt gyakorlatilag azonnali eredményt adnak. A PyTREX-Gauss modellel is a Gauss-egyenletet alkalmazzuk, ami a kibocsátott anyag mennyisége, a terjedési irányára merőleges, valamint a függőleges irányba történő szóródás, és a kibocsátás magasságában lévő szélsőbesség függvényében írja le a kialakuló szennyezőanyag koncentrációt. A légkör stabilitási viszonyait a Monin–Obukhov-féle hossz számítása során határozzuk meg.

A modellel 2011-re végeztünk szimulációkat 3 órás meteorológiai adatbázis felhasználásával az ajkai vörösiszap tározó környezetére. Azt feltételezve, hogy a tározóból a kiporzás elvileg folyamatos és csak a szélsőbességtől függ, a 2011-es évre meghatároztuk a tározóból származó por által okozott éves porterhelés mértékét a vörösiszap-tározó 10 km-es környezetében (Ludányi, 2014).

RAPTOR

A Lagrange szemléletű RAPTOR modell a PyTREX-Lagrange modell továbbfejlesztése, ami kontinentális, vagy akár globális skálán képes a radioaktív részecskék terjedésének és ülepedésének szimulációjára. A futtatáshoz szükséges meteorológiai adatokat a Global Forecast System (GFS) szolgáltatja $0,5 \times 0,5^\circ$ -os térbeli, és 3 órás időbeli felbontásban. A domborzatot a Global Land One-km Base Elevation Project adatbázisa alapján vesszük figyelembe. Az egyes rácscellákban a terjedést az átlagos szél és a sztochasztikus turbulens áramlás összegeként írjuk le. A modell eredménye a nagyszámú trajektóriák összességéként előálló koncentráció mező, illetve a meteorológiai mezők felhasználásával származtatott ülepedési mező. A globális léptékű modell lehetőséget biztosít arra, hogy a világ bármely pontján bekövetkezett pontbeli kibocsátás hatását értékeljük.

A RAPTOR modellel a Fukushimai Atomerőműben 2011. március 11-én történt baleset utáni időszakra vizsgáltuk a légkörbe kerülő radioaktív szennyezők globális léptékű terjedését (e munka jelenleg publikálás alatt).

Ülepedési modell

A légköri szennyezőanyag terjedési modellekben a száraz és nedves ülepedés általában csak egyszerűen parametrizált mennyiségek. Ugyanakkor a talaj-felszín-légkör közötti kölcsönhatások vizsgálata során a kiülepedő szennyezőanyag jóval pontosabb becslésére lehet szükség. Ezt a mennyiséget különböző ülepedési sémákkal adhatjuk meg. Az általunk fejlesztett ülepedési modell nyomgázok – elsősorban az ózon – száraz ülepedését számítja egy adott

pont, vagy rácsnégyzet felett a talaj, a felszín és a légkör fizikai állapotának és jellemzőinek, valamint a nyomgáz légköri mennyiségének a függvényében. A modellben a sugárzás- és energiaháztartás, valamint a vízháztartás becslése révén származtathatók az ülepedést gátló tényezők, amiket a modellben egy ellenállás hálózat ír le. Az egyes ellenállás tagok a felszín feletti légtér turbulens áramlása (aerodinamikai ellenállás), közvetlenül a felszín feletti vékony rétegben történő molekuláris diffúzió (kvázi lamináris réteg ellenállása) és a felszín – pl. növényállomány – felfogó képessége (felszíni ellenállás) által meghatározott ülepedést, az ún. ülepedési sebességet jellemzik. Az ülepedési sebesség és a nyomgáz felszínközeli gradiensek ismeretében pedig megadható a felszínre ténylegesen kikerülő nyomgáz mennyisége, vagyis a nyomgázfluxus. A vizsgált pontokban a koncentráció értékeket pontbeli mérések, vagy szennyezőanyag terjedési modellek szolgáltatják. Így a terjedési és ülepedési modelleket összecsatolva mind a légköri koncentráció, mind a ki-ülepedő mennyiség becsülhető.

A modellel az ózon ülepedést számítottuk különböző felszínek felett, illetve részletes érzékenységi vizsgálatokat végeztünk. Az érzékenységi vizsgálatok rámutattak, hogy Magyarországon az ülepedés mértékét a vegetációs időszakban erősen befolyásolja a talaj nedvességtartalma (Mészáros et al., 2009a, b). Az ózon ülepedés időbeli változékonyságát adott pontokra (Mészáros et al., 2009c; Ludányi, 2015), és egy részletes ($2,5 \times 2,5$ km-es) térbeli felbontású, Magyarországot lefedő rácsra (Czender et al., 2009) számítottuk. Regionális klímamodell eredményeket felhasználva az ülepedés várható változásaira is becslést adtunk (Kolozsi-Komjáthy et al., 2011).

Összefoglalás

Az elmúlt évtizedekben több ipari katasztrófa is ráirányította a figyelmet a légköri terjedésszámítás fontosságára. A tudományos kíváncsiság és kihívás mellett egyre nagyobb a társadalmi, döntéshozói és felhasználó igény a hatékony (gyors és pontos) környezeti modellekre. A hatékonyság feltétele a modellek folyamatos fejlesztése az új tudományos eredmények, informatikai lehetőségek és a rendelkezésre álló adatbázisok bővülése révén.

A fentiekben bemutatott modellekkel számos esettanulmányt, érzékenységi vizsgálatot, részletes statisztikai elemzéseket végeztünk, eseti és folyamatos kibocsátásból származó légszennyezők terjedését és ülepedését szimulálva lokálistól kontinentális skáláig. Az egyes modellszimulációkat és az általuk nyert eredményeket a hivatkozott publikációkban mutatjuk be részletesen.

Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetet mondanak a kutatásokba, a modellfejlesztési és alkalmazási munkába az évek során bekapcsolódó hallhatóknak, doktoranduszoknak. A kutatásokat az OTKA K109109 és K116506 kutatási pályázatok támogatják.

Hivatkozások

- Czender, Cs., Komjáthy, E., Mészáros, R., Lagzi, I., 2009: Spatial and temporal variability of ozone deposition. *Advances in Science and Research*, 3: 5–7.
- Kolozsi-Komjáthy, E., Mészáros, R., Lagzi, I., 2011: Effects of the climate change on regional ozone dry deposition. *Advances in Science and Research*, 6: 103–107.
- Kovács, A., 2015: Természeti eredetű por terjedésének modellezése a WRF-Chem modellel. *Diplomamunka*, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Meteorológiai Tanszék

- Kovács, T., Lagzi, I., Leelőssy, Á., Mészáros, R., 2012: Simulations of Atmospheric Dispersion from Point Sources. III. Terrestrial Radioisotopes in Environment. Proceedings of International Conference on Environmental Protection, Veszprém, 103–106.
- Leelőssy, Á., Mészáros, R., Lagzi, I., 2011: Short and long term dispersion patterns of radionuclides in the atmosphere around the Fukushima Nuclear Power Plant. *Journal of Environmental Radioactivity*, 102: 1117–1121.
- Leelőssy, Á., Lagzi, I., Mészáros, R., 2012: Sensitivity study of OpenFOAM model for local scale atmospheric dispersion simulations. *Geophysical Research Abstracts*, 14: EGU2012-11925.
- Leelőssy, Á., Ludányi, E.L., Kohlmann, M., Lagzi, I., Mészáros, R., 2013: Comparison of two Lagrangian dispersion models: a case study for the chemical accident in Rouen, January 21-22, 2013. *Időjárás*, 117: 435–450.
- Ludányi, E., 2014: Vörösiszap-tározókból származó szennyezőanyagok légköri terjedésének modellezése. *Tudományos Diákköri Dolgozat*
- Ludányi, E., 2015: Légszennyező anyagok ülepedésének modellezése városi környezetben. *Diplomamunka*, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Meteorológiai Tanszék
- Mészáros, R., Zsély, I.Gy., Szinyei, D., Vincze, Cs., Lagzi, I., 2009a: Sensitivity analysis of an ozone deposition model. *Atmospheric Environment*, 43: 663–672.
- Mészáros, R., Szinyei, D., Vincze, Cs., Lagzi, I., Turányi, T., Haszpra, L., Tomlin A.S., 2009b: Effect of the soil wetness state on the stomatal ozone fluxes over Hungary. *Int. J. Environment and Pollution*, 36: 180–194.
- Mészáros, R., Horváth, L., Weidinger, T., Neftel, A., Nemitz, E., Dämmgen, U., Cellier, P., Loubet, B., 2009c: Measurement and modelling ozone fluxes over a cut and fertilized grassland. *Biogeosciences*, 6, 1987–1999.
- Mészáros, R., Vincze, Cs., Lagzi, I., 2010: Simulation of accidental release using a coupled transport (TREX) and numerical weather prediction (ALADIN) model. *Időjárás*, 114: 101–120.
- Mészáros, R., Leelőssy, Á., Vincze, Cs., Szűcs, M., Kovács, T., Lagzi, I., 2012: Estimation of the dispersion of an accidental release of radionuclides and toxic materials based on weather type classification. *Theoretical and Applied Climatology*, 107: 375–387.
- Molnár, F. Jr., Szakály, T., Mészáros, R., Lagzi, I., 2010: Air pollution modelling using a Graphics Processing Unit with CUDA. *Computer Physics Communications*, 181: 105–112.
- Molnár, F., Izsák, F., Mészáros, R., Lagzi, I., 2011: Simulation of reaction-diffusion processes in three dimensions using CUDA. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. (DOI:10.1016/j.chemolab.2011.03.009)

Internetes hivatkozások:

<http://www2.epa.gov/cameo/aloha-software>
<http://ready.arl.noaa.gov/HYSPLIT.php>
<http://www.openfoam.org/features/turbulence.php>
<http://www.wrf-model.org/index.php>