

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Meteorológiai Tanszék

**BALESETI KIBOCSÁTÁSBÓL SZÁRMAZÓ
SZENNYEZŐANYAGOK LOKÁLIS SKÁLÁJÚ
TERJEDÉSÉNEK MODELLEZÉSE**



Készítette:

Leelőssy Ádám

Meteorológus MSc. szakos hallgató

Témavezetők:

Dr. Mészáros Róbert

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Meteorológiai Tanszék

Dr. Lagzi István László

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizika Tanszék

Budapest, 2012.

Tartalomjegyzék

Bevezetés.....	3
1. Előzmények	4
2. Áramlási modellek áttekintése	5
2.1 Léggöri terjedési modellek	5
2.2 A szennyezőanyag-terjedés lokális skálájú modellezése	7
2.3 A Computational Fluid Dynamics (CFD) modellek meteorológiai alkalmazása	10
3. Az OpenFOAM modell bemutatása.....	12
3.1 A modellezés lépései.....	12
3.2 A geometria megadása	13
3.3 Modellválasztás: a megoldandó egyenletek.....	16
3.4 Kezdeti és peremfeltételek	22
3.5 A modell korlátai	25
3.6 Utófeldolgozás, megjelenítés	26
4. A modell paramétereinek beállítása	27
4.1 Az optimális rácsfelbontás kiválasztása	27
4.2 A konvergencia sebessége	31
4.3 A modell érzékenysége a felszín hőmérsékletére	34
4.4 A modell érzékenysége a turbulens kinetikus energia bemeneti értékére	37
5. Szennyezőanyag-terjedési szimulációk.....	39
5.1 A turbulens diffúziós együttható megadása	39
5.2 Szennyezőanyag-terjedési vizsgálatok különböző szélirányok esetén	42
5.3 Esettanulmány: a 2003-as paksi üzemzavar	46
Összefoglalás	48
Irodalomjegyzék	50
Köszönetnyilvánítás.....	54
Függelék.....	55

Bevezetés

A környezetvédelem iránti fokozott társadalmi érdeklődés és az elmúlt évek ipari balesetei a figyelem középpontjába állították a levegőminőség előrejelzését, a szennyezőanyagok terjedésének mind pontosabb modellezését. Ipari forrásokból kibocsátott szennyezőanyagok mezo- és makroskálán történő terjedésének szimulációjára az ELTE Meteorológiai Tanszékén és az Országos Meteorológiai Szolgálatnál is több szoftver áll rendelkezésre. Lokális skálán azonban, ahol az épületek áramlásmódosító hatása jelentős, a hagyományos meteorológiai modelleken alapuló terjedési szimulációk nem használhatók.

A városon belüli és ipari létesítmények üzemi területén történő szennyezőanyag-terjedés modellezése iránti növekvő igény a műszaki célú általános áramlásmodellező (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) szoftverek fejlesztőinek figyelmét egyre inkább a meteorológiai alkalmazások felé fordította. A légszennyezés elsődleges elszennvedői, a városi lakosság és az ipari létesítményekben dolgozók általában bonyolult geometriájú, beépített területeken élnek, ahol a felszínközeli szennyezőanyag-koncentrációk sikeres előrejelzéséhez elengedhetetlen az épületek által kialakított bonyolult áramlások szimulációja. Ez meghaladja az időjárási modellek képességeit, és CFD megközelítést igényel.

Az áramlástan modellezés két nagy területének, a meteorológiának és a CFD technológiának az összekapcsolása hatékony eszközt jelent a mikroskálájú folyamatok modellezésében, azonban az eltérő megközelítések és a légköri áramlások speciális tulajdonságai miatt a CFD modellek adaptálása során számos nehézség jelentkezik. A továbbiakban a terjedési modellek és a CFD technológia alapelveinek áttekintése után a nyílt forráskódú OpenFOAM szoftverrel végzett vizsgálatainkat mutatjuk be. A modellt ipari eredetű, elsősorban a Paksi Atomerőmű területén bekövetkező baleseti kibocsátások pontosabb modellezése érdekében alkalmazzuk. Elsődleges célunk volt a modell alapvető tulajdonságainak érzékenységi vizsgálatokon keresztül történő megismerése a későbbi eredmények megbízhatóságának alátámasztása érdekében. A szoftver használatának megkönnyítésére saját vezérlő és adatkezelő programokkal tettük lehetővé az OpenFOAM kevés felhasználói beavatkozást igénylő, akár időzített vagy online futását. Szennyezőanyag-terjedési szimulációk során bemutattuk az épületek körül kialakuló bonyolult áramlási viszonyokat, valamint a programkód módosításával pontosabbá tettük a turbulens diffúzió modellezését.

1. Előzmények

Az ELTE Meteorológiai Tanszékén évek óta folyik a légköri szennyezőanyagok terjedésének és ülepedésének vizsgálatára alkalmas modellek fejlesztése, valamint a Paksi Atomerőművel való együttműködés révén az erőműből származó esetleges baleseti kibocsátások következményeinek modellezése. Egy baleseti eredetű radioaktív szennyezés terjedésének különböző méretskálán történő szimulációjára a Paksi Atomerőműben lagrange-i (RODOS) és gaussi (SINAC, BALDOS) típusú terjedési modellek állnak rendelkezésre (Földi et al., 2010). Ezek mellett a közelmúltban az erőmű 30 km-es környezetében, az ún. sürgős óvintézkedések zónájában kialakuló aktivitáskoncentrációk előrejelzésére az ELTE Meteorológiai Tanszéke, a Radioökológiai Tisztaságért Társadalmi Szervezet és a Paksi Atomerőmű Sugárvédelmi Osztálya közösen kifejlesztette az euleri és lagrange-i szemléletmódú TREX modellt (Dombovári et al., 2008). A TREX alkalmazásának kezdete óta eltelt néhány évben felmerült az igény az erőmű üzemi területére végzett, mikroskálájú modellezésre is a létesítményben dolgozók védelme és a baleseti forgatókönyvek pontosítása érdekében.

A mikroskálájú terjedési problémák megoldására számos megközelítés létezik. Korábban, BSc szakdolgozatom keretében egy mikrometeorológiai célokra átalakított légköri modell, az A2C előzetes tesztelését végeztem el (Leelőssy, 2010). Később egy egyszerű gaussi megközelítést használó terjedési modellt, az ALOHA-t alkalmaztuk statisztikai vizsgálatokra és baleseti esettanulmányokra (Mészáros et al., 2011). A szerzett tapasztalatok alapján célunk egy olyan áramlási modell adaptálása a Paksi Atomerőmű területére, amely képes az épületek áramlásmódosító hatásának figyelembe vételével az üzem területén, a kibocsátás néhány száz méteres környezetében kialakuló szélviszonyok és a terjedés szimulációjára. Választásunk az OpenFOAM általános célú áramlási modellre esett, amelynek adaptálása és operatív alkalmazásra való előkészítése a jelen dolgozat témája.

2. Áramlási modellek áttekintése

2.1 Léggöri terjedési modellek

A légszennyezés problémaköre az ipari forradalom idején jelent meg a köztudatban, a széntüzelés elterjedésével a városi szmoghelyzetek a XX. század első felében pedig már számos áldozatot követeltek. A légszennyezés tudományos kutatása az 1940-es években kezdődött, az azóta eltelt évtizedekben a tudományos eredményeknek és a rájuk épülő nemzetközi egyezményeknek köszönhetően bizonyos légszennyező gázok, elsősorban a kén-dioxid kibocsátása jelentősen visszaesett, azonban a szmoghelyzetek továbbra is súlyos gondot jelentenek a világ szinte minden nagyvárosában.

Természetes volt az igény a városok és ipari területek levegőminőségének előrejelzésére a környezetvédelmi rendelkezések alátámasztása és az egészségügyi hatások becslése céljából. Az ipari pontforrásokból és diffúz városi forrásokból származó szennyezőanyagok terjedésének becslésére számos számítógépes modell született, amelyek többsége az egyszerűen kezelhető gaussi megközelítést alkalmazza (Szepesi, 1981; Sriram et al., 2006). A gaussi terjedési modellek a szennyezőanyag koncentrációjának függőlegesen és szélirányra merőlegesen a forrás tengelyétől számított Gauss-eloszlását feltételezik, amelyhez hozzáadódik a szél irányába történő transzport. A keresztirányú terjedés mértékét – az eloszlás szélességét – a turbulens diffúzió figyelembevételével számítják, amit különböző stabilitási paraméterek alapján határoznak meg. A gaussi modellek a néhány kilométertől néhány tíz kilométerig terjedő skálájú levegőminőségi vizsgálatokban széles körben elterjedtek, használatuk az ipari létesítmények környezetvédelmi hatástanulmányainak is részévé vált (Szepesi, 1981).

Az 1986-ban Csernobilban történt baleset után világszerte megkérdőjelezték az ipari létesítmények, különösen az atomerőművek biztonságát. A társadalmi nyomás hatására sürgetővé vált az esetleges ipari balesetek következményeinek előzetes felmérése, a lakossági tájékoztató és riasztó rendszerek kiépítése, valamint az ipari létesítmények biztonságának fokozása. Ehhez alapvető szükség volt pontos léggöri terjedési modellek létrehozására, amelyek egy esetleges baleseti kibocsátás következményeit a meteorológiai viszonyok figyelembe vételével nagy méretskálán is képesek előrejelezni.

A korábbi légszennyezési epizódok és ipari balesetek hatása 10–100 kilométeres méretskálára terjedt ki, a Csernobilban történt baleset következményei azonban egész

Európát érintették, a radioaktív I-131 gáz hatása pedig világszerte kimutatható volt (Pudykiewicz, 1988). A rendelkezésre álló gaussi terjedési modellek ilyen nagy méretskálán nem voltak alkalmazhatók, mert az áramlási mező idő- és térbeli változása, valamint a domborzat áramlásmódosító hatása miatt a koncentrációmező jelentősen eltért a gaussi eloszlástól. Ez előtérbe helyezte a globális vagy kontinentális skálájú időjárás-előrejelző modellekhez hasonló, rácsponti (ún. euleri) terjedési modellek fejlesztését (Piedelievre et al., 1990, Pudykiewicz, 1988). Az euleri modellek az (1) terjedési egyenlet numerikus megoldásán alapulnak, és néhány tíz kilométerestől akár a szinoptikus, ezer kilométeres méretskáláig használhatók:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\underline{v}\nabla c + \nabla \underline{K}\nabla c + S, \quad (1)$$

ahol \underline{v} az adott rácspontban érvényes sebességvektor, c a koncentráció, K pedig a turbulens diffúziós együtthatók mátrixa (Mészáros et al., 2010). Az (1) terjedési egyenlet jobb oldalán szereplő tagok rendre a szél által történő advekciót, a turbulens diffúziót, valamint a kibocsátásból, kémiai reakciókból, radioaktív bomlásból és a száraz, valamint nedves ülepedésből származó forrás- és nyelő tagokat írják le. Az euleri modellek önálló fejlesztésként, egy külső légköri modellből származó szélmezőt felhasználva (pl. MEDIA, CHIMERE, TREX), vagy egy mezoskálájú meteorológiai modell részeként (pl. WRF-Chem) is elterjedtek (Piedelievre et al., 1990; Mészáros et al., 2010; Huh et al, 2012).

A nagyskálájú szennyezőanyag-terjedés modellezésére alkalmazott másik (ún. lagrange-i) modellcsalád egyes részecskéknek az időjárás-előrejelző modellből rendelkezésre álló szélmezőben történő sodródását szimulálja, és egy adott helyről indított szennyezőanyag-csomag trajektóriáját rajzolja ki (pl. a brit NAME modell: Dacre et al., 2011). A részecske időegység alatti elmozdulását az áramlás iránya, a sűrűségkülönbségből származó felhajtóerő és a véletlen bolyongással modellezett turbulens diffúzió adja meg. Kellően nagy számú részecske trajektóriájának kiszámítása esetén a kibocsátott szennyezőanyag-csomagok (ún. puffok) szuperpozíciójából a koncentrációmezőre lehet következtetni (Yamada, 2000). A lagrange-i modellek a kibocsátás közelében fellépő nagy gradienseket az euleri modelleknél nagyobb pontossággal adják vissza (Lagzi et al., 2004). Hátrányuk, hogy a változók rácson történő megjelenítéséhez interpolációra van szükség. Az időjárás modellekével azonos rácson futtatható euleri modellek pontosságát a kibocsátáshoz közeli területeken beágyazott lagrange-i modell használatával (pl. a

DREAM modellben: Brandt et al. 2002), vagy változó felbontású, adaptív rács alkalmazásával lehet javítani (Lagzi et al., 2004).

Az euleri és lagrange-i terjedési modelleket az elmúlt évtizedekben egyaránt nagy sikerrel alkalmazták különböző méretskálájú problémák megoldására: a csernobili baleset következményeinek utólagos felmérésére (Pudykiewicz, 1988; Brandt et al., 2002), ipari létesítmények baleseti hatástanulmányainak elkészítésére, illetve a nukleáris balesetek kezelésére létrehozott döntéstámogató RODOS (*Real-Time On-line Decision Support*) rendszerben (Mikkelsen et al, 1997). Napjainkra mindhárom modelles család képviselőivel találkozunk a városi és ipari területek levegőminőségének előrejelzésében is (ezekről áttekintést ad pl. Holmes and Morawska, 2006). A folyamatos fejlesztésnek köszönhetően az euleri és lagrange-i modellekkel a 2010-es izlandi vulkánkitörés és a 2011-ben bekövetkezett fukushimai reaktorbaleset során kiszabadult anyagok terjedését világszerte eredményesen szimulálták, pontos előrejelzéseket biztosítva a hatóságoknak és a közvéleménynek a várható következményekről (Dacre et al., 2011; Huh et al., 2012).

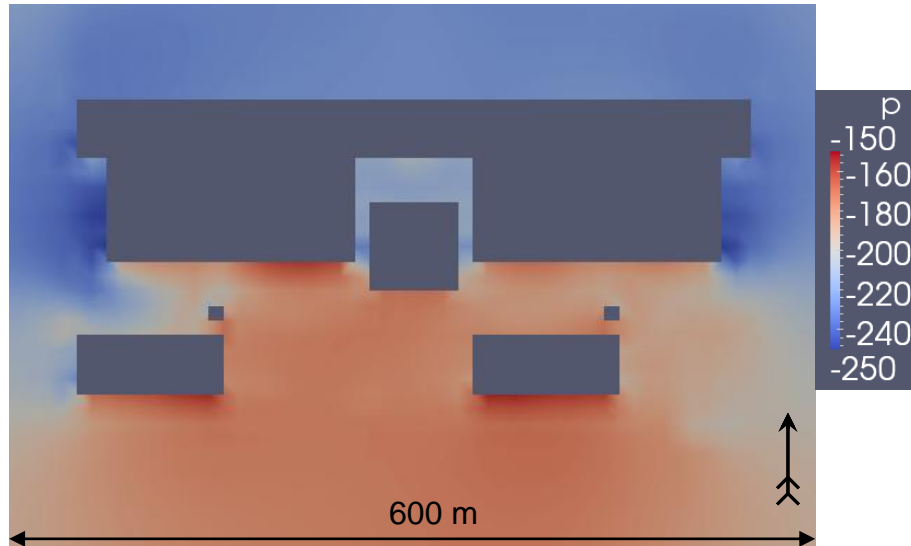
Magyarországon az Országos Meteorológiai Szolgálatnál regionális és kontinentális skálájú szennyezőanyag-terjedés szimulációjára a FLEXPART lagrange-i terjedési modellt fejlesztik (Kocsis et al., 2009). Budapest levegőminőségéről a CHIMERE euleri modell biztosít a közvélemény számára is hozzáférhető előrejelzéseket. Környezeti hatástanulmányok elkészítésére és ipari létesítmények környezetvédelmi kockázatának kiszámítására az AERMOD továbbfejlesztett gaussi modellt használják (Steib and Labancz, 2005). A Paksi Atomerőműből történő kibocsátások szimulációjára kontinentális méretskálán a nemzetközi RODOS döntéstámogató rendszerbe integrált RIMPUFF lagrange-i modell (Mikkelsen et al, 1997), az erőmű 30 km-es környezetében, az ún. sürgős óvintézkedések zónájában pedig az ELTE Meteorológiai Tanszékén kifejlesztett TREX euleri-lagrange-i modell áll rendelkezésre (Mészáros et al., 2010).

2.2 A szennyezőanyag-terjedés lokális skálájú modellezése

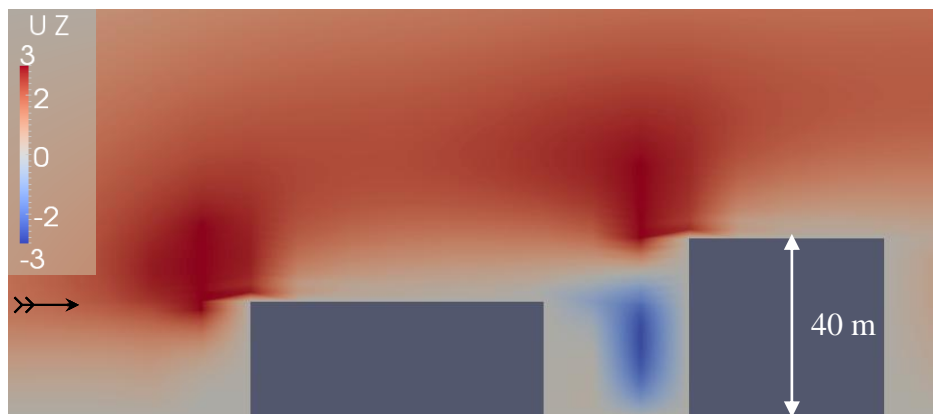
A városi és ipari területek levegőminőségének előrejelzésében a gaussi terjedési modellek gyors és kézenfekvő megoldást nyújtanak, alkalmazhatóságuk azonban gyorsan változó időjárási körülmények, vagy stabil légköri rétegződés esetén korlátozott, és pontosságuk is sok esetben megkérdőjelezhető (Sriram et al., 2006). A számítástechnika fejlődésének köszönhetően a nagyobb számítási igényű, de pontosabb eredményeket nyújtó

euleri és lagrange-i modellek a néhány tíz kilométeres méretskálájú terjedési feladatok megoldásában is kiegészítették vagy felváltották a gaussi modelleket (pl. Dombovári et al., 2008). A méretskála további csökkentésével azonban az euleri terjedési modellek bemenetéül szolgáló légköri modellek alkalmazhatósága is korlátokba ütközik. Lokális skálán, a kibocsátás 1 km sugarú környezetében az épületek és más tereptárgyak hatása mind a nyomás-, szél- és turbulenciaviszonyokban jelentős, ami nem engedi meg a meteorológiai modellek közelítéseinek alkalmazását:

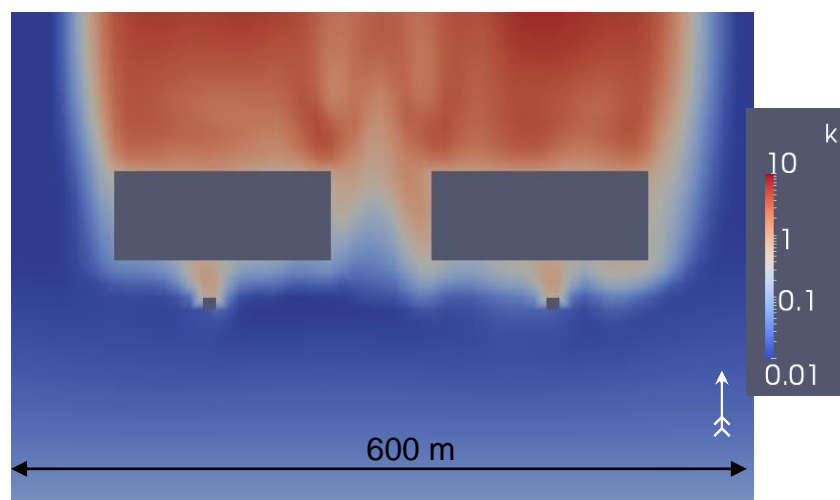
- az épületek szél felőli és szélvédett oldala közötti horizontális nyomáskülönbség a szélességtől és az épület méretétől függően 10–100 Pa nagyságrendű, ami csak egy vagy két nagyságrenddel kisebb a vertikális nyomási gradiensnél (1. ábra);
- az épületekhez közel a függőleges sebességek összemérhetők a vízszintes irányú alapáramlás sebességével, az épületek emelő hatása következtében létrejövő feláramlás pedig az épület magasságának többszöröséig jelentős marad (2. ábra);
- a turbulencia erősségét jellemző turbulens kinetikus energia az épületek mögötti turbulens zónában 0,1–1 J/kg nagyságrendű (Gartmann et al., 2009), ami 2–3 nagyságrenddel nagyobb lehet az alapáramlásénál (3. ábra).



1. ábra: 20 m magasan mérhető nyomási mező (Pa) a Paksi Atomerőmű területén (szélirány nyíllal jelölve), az OpenFOAM eredményei alapján. A 0 Pa referenciaryomás a felszínen mérhető normál légköri nyomás. A nyomáskülönbség az épületegyüttes két oldala között megközelíti az 1 hPa-t.



2. ábra: két épület között kialakuló le- és feláramlások sebessége (m/s) nyugat-keleti metszeten az OpenFOAM eredményei alapján. A színezés a függőleges sebesség komponens nagyságát jelöli. Alapáramlásnak 10 m magasan 10 m/s sebességű nyugati szelet feltételeztünk. Az épületek okozta feláramlás a modelltartomány teljes magasságában jelentős.



3. ábra: a turbulens kinetikus energia 50 m magasan mérhető értékei (J/kg egységekben) a Paksi Atomerőmű területén a nyíllal jelölt szélirány esetén, az OpenFOAM eredményei alapján. Az épületek mögötti zónában a TKE 2–3 nagyságrenddel megnő.

A fenti megállapítások alapján lokális, 1 km alatti terjedési problémák kezelésére olyan finom felbontású háromdimenziós modellre van szükség, amely a nyomási mezőt a sebességmezővel együtt, modellváltozóként kezeli, valamint rendelkezik az épületek mentén kialakuló határrétegek turbulenciaviszonyainak modellezésére alkalmas parametrizációkkal. Ezekre a feladatokra a műszaki gyakorlatban alkalmazott *Computational Fluid Dynamics* (CFD) áramlási modellek kínálnak megoldást.

2.3 A *Computational Fluid Dynamics* (CFD) modellek meteorológiai alkalmazása

Az elérhető számítási teljesítmény növekedésével a numerikus áramlási modellek egyre nagyobb szerepet kapnak a műszaki problémák megoldásában. A hidro-termodinamikai egyenletrendszer különböző formáinak megoldásán alapuló általános célú áramlásmodellező (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) modelleket széles méretskálán használják a kémia és mikrotechnológia területén ugyanúgy, mint a gépgyártásban és a járműtervezésben (Nguyen and Wu, 2005; Johnson et al., 2003). A CFD szoftverek városstervezési és környezetvédelmi célú mikrometeorológiai alkalmazása is elterjedt (Vardoulakis et al., 2003). Ahhoz, hogy egyetlen szoftver az áramlások széles spektrumát megbízhatóan legyen képes modellezni, nagyfokú összetettségre és rugalmasságra van szükség. Ez a felhasználóra hárítja a helyes modellválasztás felelősségét, amely meghatározó az eredmények megbízhatósága szempontjából. A modellválasztás során az adott problémának megfelelő egyenletrendszer felállítása a cél, amelyhez a vizsgált áramlás alapvető tulajdonságait kell figyelembe venni.

Bár a CFD modellek nagy sikereket érnek el az áramlástan számos területén, általánosságuk miatt a meteorológia sajátos igényeihez nehezen igazíthatók (Baklanov, 2000). A meteorológiában használt áramlási modellek a hidro-termodinamikai egyenletrendszer egy speciális alakját oldják meg, amelyben a nagy méretskála, a gömbi koordináta-rendszer, a forgó közeg miatti tehetetlenségi erők, illetve a sekélység hatása és a hidrosztatikus nyomási rétegződés nagy jelentőséggel bír. A szinoptikus skálájú meteorológiai modelleknél a descartes-i koordinátarendszer helyett vízszintes irányban gömbi rendszert használnak, függőlegesen pedig a nyomási és izentróp (illetve ezeken alapuló, pl. szigma-) koordinátarendszerek használata terjedt el (Práger, 1982).

A speciális meteorológiai modellek és az általános célú CFD áramlásmodellezés találkozásának területe a mikrometeorológia, ahol az elmúlt években számos kutató vizsgálta a két megközelítés közötti eltéréseket és kapcsolódási lehetőségeket (Baklanov, 2000; Yamada, 2002; Laporte et al., 2009). A mikrometeorológiai célú CFD szimulációk a szennyezőanyag-terjedési problémákhoz kapcsolódóan terjedtek el leginkább, ahol a kis skálájú hatások, különösen a városi környezet alapvetően befolyásolja az emisszió és a környezeti terhelés alakulását (Baik et al., 2003; Lajos et al., 2003).

A városokban és ipari létesítmények üzemi területein bekövetkező légszennyezés során a szennyezőanyagok emissziója és immissziója sokszor mindössze néhány száz méteres távolságon belül valósul meg. A terjedés folyamata, a transzmisszió kis méretű, de bonyolult geometriájú környezetben játszódik le, ahol az épületek áramlasmódosító hatása nagy jelentőséget kap, ugyanakkor a környezeti áramlások bizonyos sajátosságai, mint a forgás és a sekélység, elhanyagolhatók. Ez előtérbe helyezi a CFD szoftverek használatát, amelyek az utcaszintű, ún. „street canyon” modellek révén a városi légszennyezés vizsgálatának alapvető eszközeivé váltak, és fontos adatokat nyújtanak a várostervezésben, valamint a környezetvédelmi hatóságok számára is (Vardoulakis et al., 2003; Gartmann et al., 2009).

Számos kereskedelmi és nyílt forráskódú CFD szoftver létezik, amelyek általában általános célú áramlási modellek, és meteorológiai alkalmazásuk körültekintést igényel. Ennek ellenére elterjedten használnak CFD modelleket meteorológiai problémák megoldására Magyarországon és külföldön is (Goricsán et al., 2004, Laporte et al., 2009). A legelterjedtebb kereskedelmi CFD szoftverek az Ansys cég termékei, köztük a Fluent, amelyet általános áramlástanai célokra fejlesztettek, de meteorológiai alkalmazásuk is gyakori (Chang and Meroney, 2003). Magyarországon a Fluentet és a német MISKAM modellt a Budapesti Műszaki Egyetemen futtatják műszaki és mikrometeorológiai célokra is (Lajos et al., 2003; Kristóf et al., 2007).

A CFD modellek egyre nagyobb szerephez jutnak a meteorológiában, de alkalmazásuk továbbra is számos hátránnyal jár. Bár képesek az épületek áramlasmódosító hatásának szimulációjára, és kifinomult turbulenciamodellekkel rendelkeznek, a nagyskálájú meteorológiai folyamatok hatását nem tudják megfelelően kezelni. A szinoptikus időjárási helyzetet legtöbbször stacionárius szélmezők kialakításához szükséges bemenő adatként (peremfeltételként) kezelik, ami megnehezíti a gyors időjárásbeli változások követését, vagy hosszú időre vonatkozó szimulációk futtatását. A szennyezőanyag-terjedési alkalmazásoknál további hátrány, hogy a nagy számítási igény miatt általában nem futtatható a szimuláció a planetáris határréteg teljes magasságában, ami bizonytalanságot eredményez a szennyezőanyagok átkeveredésének becslésében, valamint megnehezíti a légkör stabilitási viszonyainak figyelembe vételét (Baklanov, 2000).

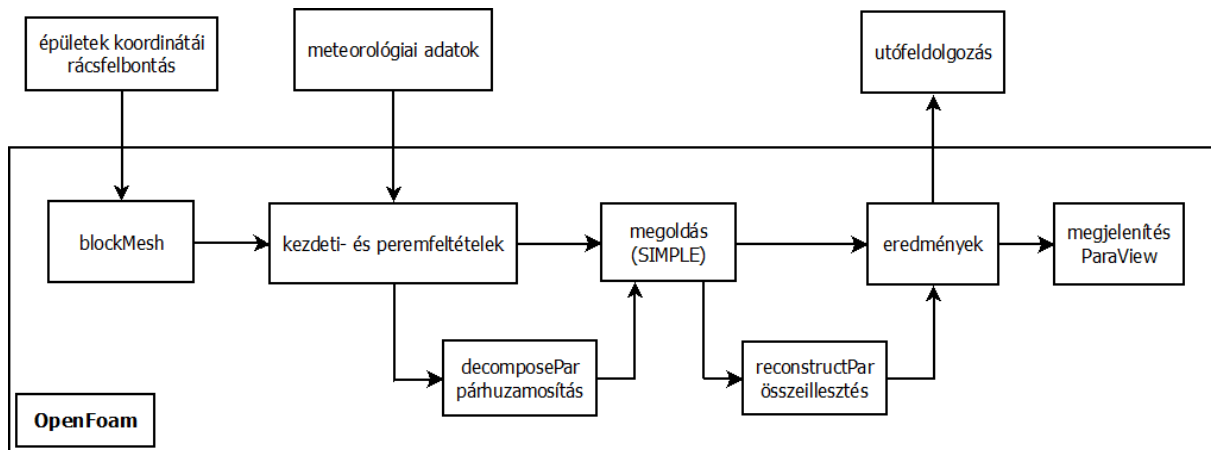
3. Az OpenFOAM modell bemutatása

A CFD technológia általánossága, a legkülönbözőbb célokra való alkalmazhatóság magával vonja a szoftverek összetettségét, rugalmasságát, valamint moduláris, elemenként összeilleszthető felépítését. Ezek a tulajdonságok adták a motivációt a nyílt forráskódú, szabadon hozzáférhető rendszerek használatára, amelyek dinamikus fejlődést mutatnak (Jasak, 2009). Az általunk választott OpenFoam ingyenes, nyílt forráskódú CFD szoftver. Elterjedtsége és szabad hozzáférhetősége miatt gazdag eszköztárral rendelkezik numerikus megoldók és kiegészítő alkalmazások terén, amelyekkel különleges, pl. mikrometeorológiai feladatok elvégzésére is képessé tehető. Alapos dokumentációja, átlátható felépítése és szabadon hozzáférhető fejlesztései pedig lehetővé teszik az egyéni igényekre történő testreszabást (Jasak et al., 2007).

A nyílt forráskódú rendszerek megbízhatóságával kapcsolatos aggályok alapját a szabad fejlesztés és a nem megfelelő dokumentáció adja. Az OpenFoam az egyik legelterjedtebben használt ingyenes CFD szoftver, ennek köszönhetően meteorológiai alkalmazások, valamint más modellekkel való összevetések terén is gazdag irodalommal rendelkezik (Cheng and Liu, 2011, Muntean et al, 2009). Kifejezetten mikrometeorológiai célú vizsgálata során a német VDI szabvánnyal és a Fluent eredményeivel való összevetés során is megbízható eredményeket adott (Franke et al., 2011). Az OpenFOAM elterjedtségének köszönhetően szponzorok is támogatják a fejlesztést, ami lehetővé tette a részletes dokumentáció elkészítését, valamint a felhasználóktól beérkező kiegészítő modulok alapos felülvizsgálatát. Az elterjedtség további előnye, hogy az interneten elérhető tematikus fórumok nagyban megkönnyítik a szoftver kezelésének elsajátítását, ismertetik az elérhető kiegészítőket, és ötleteket adnak a hibakereséshez.

3.1 A modellezés lépései

Az áramlások modellezésének legfontosabb feladatait az *4. ábra* mutatja. Az OpenFOAM a folyamat minden lépésére többféle megoldást kínál, amelyekből a felhasználó választhatja ki az adott feladatnak megfelelő modulokat.



4. ábra: az áramlásmodellezés lépései és a bemenetül szolgáló adatok.

Az egyes modulok egymás utáni beállítását és futtatását a felhasználónak kell elvégeznie, ami nagyfokú rugalmasságot biztosít, ugyanakkor sok esetben rendkívül körülményes. Mivel célunk a modell operatív alkalmazásának előkészítése, létrehoztunk egy vezérlő programokból álló hátteret, amely a felhasználó által megadott alapvető bemenő adatokból (rácsfelbontás, épületek elhelyezkedése, meteorológiai állapotjelzők) előállítja a számítási rácsot és a peremfeltételeket, megfelelő sorrendben lefuttatja az egymást követő modulokat, majd az eredményeket előkészíti utófeldolgozás céljára. Az általunk megírt programcsomag lehetőséget biztosít az OpenFOAM időzített és ismételt futtatására is, így felhasználói beavatkozás nélküli (online) használata, illetve sokszori modellfuttatással járó érzékenységi vizsgálatok elvégzése is lehetségessé vált. A modellezés különböző lépéseit összekapcsoló főbb utasítások a függelékben megtalálhatók.

3.2 A geometria megadása

Az OpenFOAM a véges térfogatok módszerével oldja meg a hidrodinamikai egyenletrendszer. A modellezés első lépése az ehhez szükséges számítási rács létrehozása, amely tartalmazza a vizsgált struktúra geometriáját, kijelöli a határfelületeket, valamint a megadott felbontással cellákra osztja fel a modellteret, amelyek később a diszkretizálás alapjául szolgálnak. A cellák alakja valamilyen poliéder (általában tetraéder vagy téglatest) lehet. Az általunk alkalmazott rács esetében téglatest alakú cellákra osztottuk fel a modelltartományt. Ennek előnye, hogy a meteorológiai modellekéhez hasonló rácsot biztosít, a téglatestek élhosszaival könnyen definiálható a felbontás fogalma, valamint a

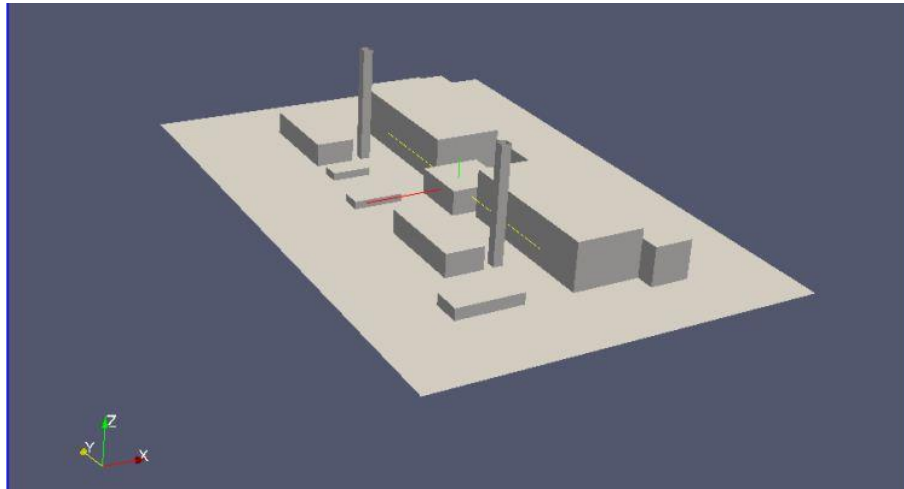
számított adatok már négyszöggrácra vonatkoznak, így interpoláció nélkül kinyerhetők. A téglatestrács kézenfekvő megoldás olyan „szögletes” formákat tartalmazó problémák esetében, ahol nem kell komplex struktúrákat, például gömböket, hajlatokat figyelembe venni.

A tetraéder alakú cellák létrehozása általános esetben, tetszőleges alakú modelltartomány mellett lehetséges. A felbontást itt a cellák térfogatának, illetve élhosszának maximális értékével jellemezhetjük, a kimenő adatok négyzetrácson történő megjelenítéséhez pedig interpoláció szükséges.

Az OpenFoam két beépített modult tartalmaz a megoldás alapjául szolgáló rács („*mesh*”) létrehozására. A legegyszerűbb ezek közül a *blockMesh* eszköz, amely könnyen átlátható szerkezetű téglatestrácsot hoz létre. Bonyolultabb külső generátorok (pl. NetGen, Salomé) tetragonális és más poliéder alapú rácsainak importálása is lehetséges. A helyes rácsválasztás nagy jelentőségű az eredmények megbízhatóságának szempontjából. Hefny and Ooka (2008) épületek körüli terjedési problémák téglatest alakú és tetragonális rácson történő vizsgálata során a következő megállapításokat tették:

- a téglatestrácsok jobb eredményeket mutattak az épületek körüli szennyezőanyag-terjedés modellezésében, valamint
- a rács típusból és -felbontásból adódó hiba számszerűsíthető, és a hiba mértékének közzététele a CFD szimulációk eredményeivel együtt szükséges.

Vizsgálatainkat a Paksi Atomerőmű környezetére végeztük, mivel a modellfejlesztés elsődleges célja az erőmű üzemi területén történő szennyezőanyag-terjedés szimulációja. A vizsgált terület 400 x 600 m kiterjedésű sík felszín, a modelltartomány függőleges kiterjedése 120 méter volt. Az üzem geometriáját 11 téglatest alakú épületre egyszerűsítettük, így számunkra a *blockMesh* által létrehozott téglatestrács volt a kézenfekvő választás. A vizsgált geometriát az 5. ábra, az épületek koordinátáit az 1. táblázat mutatja.



5. ábra: a Paksi Atomerőmű épületeinek elhelyezkedése.

1. táblázat: a Paksi Atomerőmű épületeinek elhelyezkedése.
 A tartomány mérete 400 x 600 m, a délkeleti alsó sarok koordinátája (0 0 0).

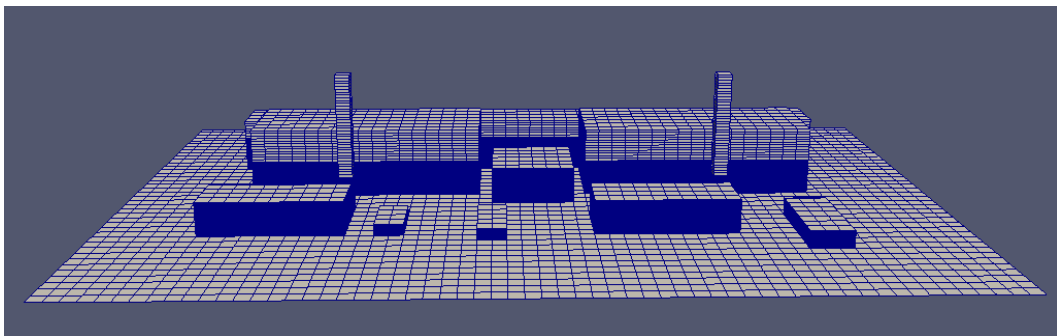
<i>Délkeleti alsó sarok koordinátái (m)</i>	<i>Északnyugati felső sarok koordinátái (m)</i>
(160 160 0)	(170 170 100)
(160 430 0)	(170 440 100)
(200 90 0)	(270 260 50)
(200 340 0)	(270 510 50)
(270 70 0)	(310 530 40)
(180 270 0)	(240 330 26)
(110 160 0)	(150 260 24)
(110 430 0)	(150 530 24)
(80 90 0)	(150 120 12)
(100 320 0)	(150 340 8)
(110 390 0)	(150 410 8)

A *blockMesh* bemeneti adatformátuma már néhány épület esetén is igen bonyolult. A vizsgált 11 épületet tartalmazó struktúrában a modelltartományt 1314 kisebb tartományra („blokkra”) kellett osztani, amelyeken belül elvégzi a program a rács legyártását. A blokkok csúcsainak koordinátáit, illetve a határfelületeken lévő oldalak kijelölését és irányítását is meg kellett adnunk. Azért, hogy a bemenő adatfájl hosszadalmas létrehozását egyszerűbbé tegyük, és ezzel megkönnyítsük a geometria, a felbontás vagy a modelltartomány méretének megváltoztatását, létrehoztuk az „*epit*” nevű programot, amely a felhasználó által egyszerűen megadható adatokból legyártja a *blockMesh* bemenetétül szolgáló fájlt.

Az „*epit*” program számára szükséges bemenő adatok:

- modelltartomány délkeleti alsó sarkának és északnyugati felső sarkának koordinátái;
- épületek délkeleti alsó sarkának és északnyugati felső sarkának koordinátái;
- vízszintes x és y irányú felbontás;
- függőleges felbontás a felszín közelében és a felszíntől távol;
- a két függőleges felbontás közötti váltás magassága.

A számítási rácsot 10 m vízszintes, valamint 30 méter alatt 0,5 m, 30 méter felett 2 m függőleges felbontás mellett a 6. ábra mutatja.



6. ábra: a számítási rács 10 m vízszintes felbontás, valamint 30 méteres magasságig 0,5 m, felette 120 méteres magasságig 2 m függőleges felbontás mellett

A geometriai adatok megadása után az általunk megírt „*epit*” program és az OpenFOAM *blockMesh* moduljának futtatása egymás után, automatikusan történik. Az „*epit*” által létrehozott blokkok és határfelületek koordinátái alapján a *blockMesh* elvégzi a számítási cellák indexelését, és fájlokban eltárolja a megoldáshoz szükséges adatokat: a csúcsok koordinátáit, a cellaszomszédok indexeit, az egyes cellák élhosszait, valamint a peremeken lévő határfelületek méretét és irányítását.

3.3 Modellválasztás: a megoldandó egyenletek

Az OpenFoam számos numerikus megoldóval rendelkezik, amelyek különböző problémák kezelésére alkalmasak. Meteorológiai célú alkalmazásoknál elvárás a nyomás hidrosztatika miatti változásának kezelése, valamint a légrések közötti hőmérsékletkülönbségből származó felhajtóerő figyelembe vétele. Ezért olyan megoldót választottunk, amely a felhajtóerő hatását beépíti a mozgásegyenlet függőleges komponensébe.

Az időjárás-előrejelző modellek lényegükből adódóan időfüggőek, és eredményüket döntően befolyásolja a kezdeti mező helyes megadása. Esetünkben azonban a teljes modelltartományra egyetlen meteorológiai mérőpont, vagy egy mezoskálájú modell rácspontja szolgáltatja a bemenő adatokat, amit peremfeltételként kezelünk. A modelltartomány kis léptéke miatt a külső hatások (peremfeltételek) már néhány perc után meghatározóvá válnak az áramlási kép alakításában, a kezdeti feltételeknek az idővel gyorsan csökken a jelentőségük. A finom felbontás miatt a stabil futáshoz szükséges időlépés 1 s körüli, míg a meteorológiai mérésekből származó peremfeltételek ennél lényegesen rosszabb időbeli felbontással, 10 percenként vagy óránként állnak rendelkezésre. A CFD modellben emiatt stacionárius közelítést használtunk, amely az aktuálisan mért meteorológiai adatokból előállítja a következő mérésig tartó rövid időtartamra érvényes, stacionárius szélmezőt. A kezdeti feltételek minél pontosabb megadásának a konvergenciához szükséges iterációk számának csökkentésében van jelentősége.

A fenti szempontok alapján kiválasztott *buoyantBoussinesqSimpleFoam* nevű megoldó az összenyomhatatlan, stacionárius, sűrűdásos és turbulens áramlásra vonatkozó hidrodinamikai egyenletrendszer oldja meg (Lajos, 2008; Patankar and Spalding, 1972):

$$\nabla \underline{v} = 0, \quad (2)$$

$$(\underline{v} \nabla) \underline{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \underline{g}' + \nu \nabla^2 \underline{v} + \nu_T \nabla^2 \underline{v}, \quad (3)$$

$$\underline{v} \nabla T = \kappa \cdot \nabla^2 T + S_T, \quad (4)$$

ahol \underline{v} a sebességvektor, p a nyomás, ρ a sűrűség, ν a kinematikai és ν_T a turbulens viszkozitás. A (3) egyenletben szereplő utolsó tag a választott turbulenciamodelltől függően más alakú is lehet. A (4) egyenlet a T hőmérséklet (vagy bármely más skalármennyiség) transzportját írja le κ hővezetési együttható és S_T forrástag mellett. A levegő és a felszín hőmérsékletét a peremfeltételek között kell megadnunk. Az adott pontban érvényes sűrűséget a térfogati hőtágulási együttható ismeretében a hőmérsékletből számítjuk. A besugárzás hatását a meteorológiai modellektől eltérő módon közvetlenül nem parametrizáljuk, hanem a felszín hőmérsékletét, mint alsó peremfeltételt vesszük figyelembe. Ahogy arra korábban is rámutattunk, ez a műszaki gyakorlatból származó

felépítés jelentősen megnehezíti a légköri stabilitási és sugárzási viszonyok beépítését a modellbe (Baklanov, 2000).

A \underline{g}' vektor harmadik komponensében a Boussinesq-közelítéssel vesszük figyelembe az adott szinten fellépő sűrűségkülönbségből adódó felhajtóerő hatását:

$$g' = g \frac{\rho' - \rho}{\rho}, \quad (5)$$

ahol ρ' az adott pontban, ρ pedig annak környezetében mérhető sűrűség.

A stacionárius közelítés révén a (2)–(4) egyenletek megoldását iterációval keressük. Az egyenletrendszer megoldására alkalmazott SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) algoritmust Patankar and Spalding (1972) alkotta meg, és különböző változatai mára a véges térfogatok módszerét alkalmazó CFD modellekben szinte kivétel nélkül megtalálhatók. A SIMPLE alapötlete, hogy a (3) Navier–Stokes-egyenlet a nyomási mezőt adottnak tekintve a sebességekre megoldható. Az algoritmus első lépése során egy feltételezett kiindulási nyomási mező alapján megoldjuk a (3) egyenletet. A kapott sebességmező ismeretében a nyomásra a (3) egyenlet divergenciáját véve, majd a (2) egyenletet felhasználva egy Poisson-egyenletet kapunk:

$$\nabla^2 p = -\rho \nabla \cdot (\underline{v} \nabla) \underline{v}, \quad (6)$$

amelynek megoldásával származtatható a nyomási mező következő becslése. A (3), (4) és (6) egyenletek egymás utáni megoldásával az iterációt addig folytatjuk, amíg a sebességmező kielégíti a (2) kényszerfeltételt, a divergenciamentességet.

A SIMPLE algoritmus lépései összefoglalva (Patankar and Spalding, 1972):

1. u_n, v_n, w_n, p_n megadása („guess”),
2. (3) egyenletből p_n alapján $u_{n+1}, v_{n+1}, w_{n+1}$ kiszámítása,
3. (6) egyenletből $u_{n+1}, v_{n+1}, w_{n+1}$ alapján p_{n+1} kiszámítása,
4. 2-3. lépés folytatása, amíg a (2) egyenlet nem teljesül.

Az egyenletek diszkretizálását a modell téglalatest alakú cellákon végzi el. Az összes változó értéke a cellák középpontjában van értelmezve, ezért a megoldás során a sebességkomponenseket interpolálni kell a cellák oldalainak középpontjára. Ezt a modellben másodrendű pontosságot biztosító lineáris interpolációval végeztük, kivéve a nemlineáris advektív tag esetében, ahol egyoldali („upwind”) sémát használtunk. A diszkretizált egyenletek pontos alakját az OpenFOAM dokumentációjára hivatkozva (<http://www.foamcfld.org/Nabla/guides/ProgrammersGuidese9.html>) itt nem részletezzük.

A turbulencia és a határrétegek parametrizációja mikroskálán különösen fontos. Az OpenFOAM több beépített turbulenciamodellel rendelkezik. Esetünkben a legáltalánosabban használt standard k - ε kétegyenlet-modellt választottuk, amely a megoldandó egyenletrendszerhez két új változót ad hozzá (Lajos, 2008). A k - ε modell széles körben elterjedt a CFD szoftverekben, és számos légköri alkalmazásával is találkozunk (pl. Lajos et al., 2003). A modell a turbulencia intenzitásának jellemzésére az u' , v' , w' turbulens sebesség-ingadozások által képviselt k turbulens kinetikus energiát veszi alapul:

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}). \quad (7)$$

A k turbulens kinetikus energiának, illetve annak ε disszipációjának bevezetése két új változót és a rájuk vonatkozó két transzportegyenletet csatolja a megoldandó egyenletrendszerhez (Davidson, 1997; Lajos, 2008):

$$\underline{v} \nabla k = \nabla [(v + \nu_T) \nabla k] + \nu_T (G + P) - \varepsilon, \quad (8)$$

$$\underline{v} \nabla \varepsilon = \nabla \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{1,3} \right) \nabla \varepsilon \right] + 1,44 \cdot \frac{\varepsilon}{k} (G + P) - 1,92 \cdot \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (9)$$

A (8–9) egyenletek bal oldalán a turbulens kinetikus energia, illetve a disszipáció advektív megváltozása szerepel, a lokális időbeli megváltozást a stacionárius közelítés miatt hagytuk el. A jobb oldali első tag mindkét egyenletben a lamináris és turbulens diffúzióból származó transzportot írja le, ahol ν a kinematikai és ν_T a turbulens viszkozitás. A jobb oldalak utolsó tagja mindkét esetben a disszipáció mértékét adja meg.

A (8–9) egyenletek jobb oldalán szereplő második tag a mechanikai és termikus turbulenciából származó produkciót tartalmazza. A mechanikai turbulencia keletkezése a szélmező deformációjával fejezhető ki:

$$G = 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2. \quad (10)$$

A termikus turbulencia keletkezését a hőmérsékleti (sűrűségi) rétegzettség alapján számítjuk:

$$P = \beta g \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (11)$$

ahol β a térfogati hőtágulási együttható.

A turbulens kinetikus energia és a disszipáció értékeiből származtatható a (3) egyenletben szereplő ν_T turbulens viszkozitás és a (4) egyenletben megtalálható κ hővezetési együttható értéke (Lajos, 2008):

$$\nu_T = 0,09 \cdot \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (12)$$

$$\kappa = \frac{\nu_T}{Pr_T}, \quad (13)$$

ahol Pr_T a turbulens Prandtl-szám.

A stacionárius szélmezőben történő szennyezőanyag-transzportot az OpenFOAM *scalarTransportFoam* nevű euleri terjedési moduljával szimuláltuk, amelynek kezdeti feltétele a szimuláció eredményeként kapott sebességmező, illetve a kezdeti koncentráció-eloszlás volt (7. ábra). A modul az (1) terjedési egyenletet oldja meg a sebességmezőével azonos rácson. A kis idő- és térbeli skála miatt a kémiai reakciókat és a radioaktív bomlást elhanyagoltuk. Izotróp turbulenciát feltételezve a \underline{K} mátrix a D_T turbulens diffúziós együtthatóval helyettesíthető:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\underline{\nu} \nabla c + D_T \nabla^2 c. \quad (14)$$

A turbulens diffúziós együttható értéke döntő fontosságú az eredmények megbízhatósága szempontjából. A *scalarTransportFoam* futtatásához bemenő adatként egy egész tartományra vonatkozó homogén D_T érték megadása szükséges. A D_T turbulens diffúziós együttható azonban a helyfüggő ν_T turbulens viszkozitással arányos (Baik et al., 2003):

$$D_T = \frac{\nu_T}{Sc_T}, \quad (15)$$

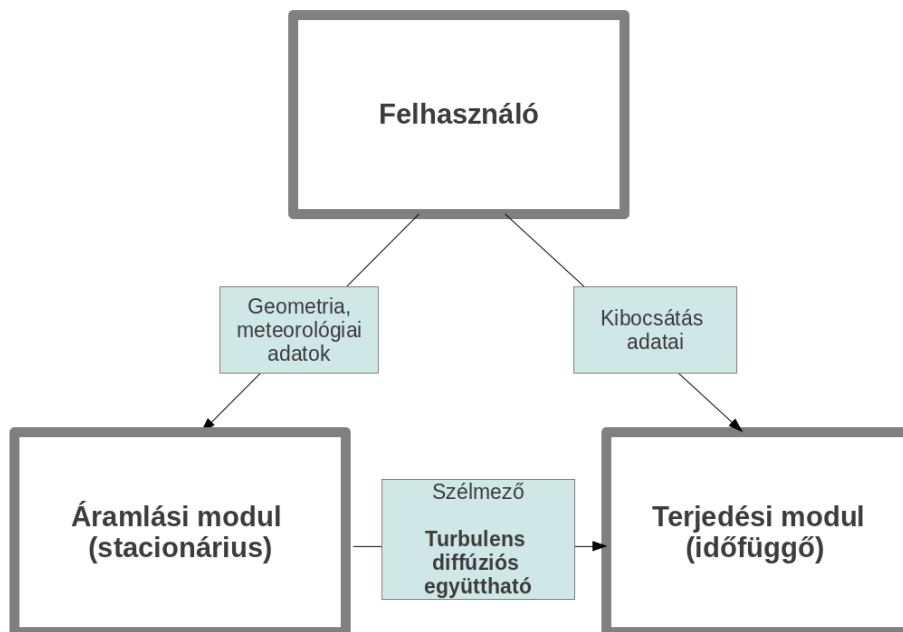
ahol Sc_T a turbulens Schmidt-szám. Mivel a turbulens viszkozitást a (12) egyenlet alapján közvetlenül a modellváltozókból származtatjuk, a (15) egyenlettel definiált turbulens diffúziós együtthatóra is egy helyfüggő skalármezőt kapunk. Ahhoz, hogy a *scalarTransportFoam* egy felhasználó által megadott homogén D_T érték helyett az áramlási modellből származó ν_T mezőből számítsa a turbulens diffúziós együtthatót, a megoldó forráskódjának módosítására volt szükség.

A turbulens diffúziós együttható helyfüggésének figyelembe vételére kínálkozó egyik lehetőség a terjedési szimuláció beépítése az áramlási modellbe, azaz a terjedési egyenlet hozzáadása a *buoyantBoussinesqSimpleFoam* megoldóhoz. Ez a módszer az OpenFOAM

felhasználói segédletében is bemutatott módon kivitelezhető lett volna, két hátránya miatt azonban mégis elvetettük a használatát:

- az áramlási modell számítási igénye jelentősen nagyobb a terjedési szimulációénál, ezért baleset esetén előnyösebb egy már rendelkezésre álló szélmezőben történő diszperziót szimulálni,
- a terjedési szimuláció beépítésével a stacionárius közelítés nem alkalmazható, ami jelentősen megnövelte volna a számítási igényt.

A fenti okok miatt a terjedési egyenletet megoldó *scalarTransportFoam* kódját módosítottuk úgy, hogy képes legyen az áramlási modellből származó v_T mező beolvasására és a diffúziós együttható skalármezőként történő helyfüggő kezelésére. Az így létrehozott „*terjedésFoam*” megoldót hozzáadva a szoftverhez a felhasználó által biztosítandó bemenő paraméterek száma eggyel csökkent, a turbulens diffúziós együttható modellváltozóvá vált (7. ábra).



7. ábra: a modell felépítése. A szoftver módosításával a turbulens diffúziós együtthatót közvetlenül az áramlási modellből, rácspontonként számítjuk.

3.4 Kezdeti és peremfeltételek

A meteorológiai adatok modellbe való bevitele a peremfeltételeken keresztül történik. A peremfeltételek megadása a modellezendő tartomány határán meghatározó a megoldás megbízhatósága és stabilitása szempontjából. Az általunk is használt stacionárius modelleknél a kezdeti feltételek jelentősége kisebb a peremfeltételekhez képest, azonban a konvergencia sebessége a helyes kezdeti állapotból indított mezővel jelentősen gyorsítható.

Valamennyi modellváltozó esetén szükséges a kezdeti feltétel megadása minden rácspontban, illetve peremfeltételek megadása a tartomány teljes határára. A rendelkezésre álló meteorológiai adatokból (szélvektor, levegő és felszín hőmérséklete) a „*metadat*” programmal hoztuk létre a peremfeltételeket tartalmazó fájlokat. Kezdeti feltételként homogén, a peremfeltételhez felhasznált bemenő adatokkal megegyező mezőket alkalmaztunk. Az általunk létrehozott „*metadat*” program és az OpenFOAM felhasználói beavatkozás nélküli futását vezérlő rutin lehetőséget biztosít arra, hogy a modell előző futásának eredményét automatikusan a következő futás kezdeti feltételének adjuk meg. Lassan változó időjárási helyzetekben a következő futtatás során a megoldás így gyorsan konvergál, miközben a peremfeltételek megváltoztatásával az időjárási helyzetben bekövetkező változások is figyelembe vehetők. Ezzel a módszerrel a modell későbbi online futtatása során észlelési periódusonként új modellfutást indítva a stacionárius CFD modell a meteorológiában megszokott 1–3 órás időskálán nézve időfüggetté tehető.

A „*metadat*” program első lépésként a szélirány függvényében három részre osztja a modelltartomány határát: a szélirány felőli (belépő) oldalakra, a kilépő oldalakra, beleértve a tartomány felső határfelületét is, valamint a felszín és az épületek falait tartalmazó alsó határfelületre. Ezekre a területekre adjuk meg a peremfeltételeket az egyes változókra vonatkozóan.

A sebességre vonatkozó peremfeltételek:

A peremfeltételek megadásához a modell minden határfelület külső oldalán egy virtuális cellát hoz létre. A belépő oldalon és az alsó határfelületen ezekben a sebességre rögzített értékű (Dirichlet-féle) peremfeltételt alkalmazunk. A bemenő széladatot egy pontra vonatkozóan kapjuk meg (mérőpontból vagy mezoskálájú modell rácspontjából), ebből a z_0 felszíni érdesség és az u^* súrlódási sebesség ismeretében

az OpenFOAM beépített *atmBoundaryLayerInletVelocity* függvénye hozza létre a horizontálisan homogén, vertikálisan logaritmikus szélprofil:

$$u(z) = \frac{u^*}{0,41} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right). \quad (16)$$

Az épületek falán és a földfelszínen rögzített 0 szélességet feltételezünk („no-slip”). A tartomány tetején és a kilépő oldalon nem ismerjük az áramlási mezőt, ezért Neumann-féle („no-gradient”) peremfeltételt használunk, amelynek lényege, hogy a peremen kívüli, virtuális cellákban lévő érték minden időlépésben megegyezik a vele szomszédos, peremen elhelyezkedő celláéval. Ez a peremfeltétel biztosítja a határfelületen történő szabad kifolyást.

A nyomásra vonatkozó peremfeltételek:

A nyomásra vonatkozóan a tartomány összes határán Neumann-féle, rögzített gradienst biztosító peremfeltételt alkalmazunk. Az oldalsó határokon a „no-gradient” peremfeltételt, a felső és alsó határfelületen a hidrosztatikából származó függőleges gradiens értékét adjuk meg.

A hőmérsékletre vonatkozó peremfeltételek:

A hőmérsékletre vonatkozóan az épületek falán és a földfelszínen rögzített értéket adunk meg peremfeltételként, a tartomány kilépő és belépő oldalain, illetve tetején pedig Neumann-féle „no-gradient” peremfeltételt használunk. A hőmérsékleti rétegződés miatti hőmérsékletváltozás a modelltartomány teljes magasságában (120 m) mindössze 1 °C körülnek becsülhető, ezért kezdeti feltételként izoterm léggörte feltételeztünk. A légköri stabilitás terjedési szempontból igen fontos tulajdonságai a CFD modellekben a felszín hőmérsékletén és a turbulens kinetikus energia értékein keresztül vehetők figyelembe, ezért ezen nehezen mérhető mennyiségek vizsgálata fontos részét képezi a meteorológiai célú CFD kutatásoknak (Gartmann et al., 2009). A felszín és a levegő hőmérséklete közötti különbség áramlási mezőre gyakorolt hatását a 4.3 fejezetben mutatjuk be.

A turbulenciára vonatkozó peremfeltételek:

A $k-\varepsilon$ modell a megoldandó egyenletrendszerhez két új változót ad hozzá, amelyekre további kezdeti és peremfeltételeket kell bevezetnünk. A kilépő oldalakon és a tartomány tetején mindkét változóra a sebességmezőhöz hasonlóan szabad kifolyást, „no-gradient” peremfeltételt alkalmazunk. A tartomány többi részén a peremfeltételek megadását az OpenFOAM-ban több beépített függvény segíti. A belépő oldalakon mindkét változóra Dirichlet-féle peremfeltételt adunk meg: a k turbulens kinetikus energiának egy kezdeti homogén értéket, az ε disszipációnak pedig az *atmBoundaryLayerInletEpsilon* függvény által kialakított függőleges profilt (Lajos, 2008):

$$\varepsilon(z) = \frac{u^{*3}}{0,41(z + z_0)}. \quad (17)$$

A felszín és falak közelében a turbulens kinetikus energia lecsökken, a sebességkomponensekkel együtt nullához tart. Alsó peremfeltételként a kialakuló viszkózus alréteg által keltett turbulenciaviszonyokat az OpenFOAM-ban is rendelkezésre álló parametrizációk, ún. falfüggvények révén vettük figyelembe (Davidson, 1997). A modell egyenleteiben szereplő legfontosabb állandók értékeit a 2. függelék tartalmazza.

A koncentrációra vonatkozó kezdeti és peremfeltételek:

A modell által előállított stacionárius áramlási mezőben futtatott szennyezőanyag-terjedési szimulációk szükségszerűen időfüggőek, ezért a koncentrációra vonatkozó kezdeti feltételek is nagy jelentőséggel bírnak. A kibocsátás paramétereit egyszeri (pillanatszerű) kibocsátás esetén a kezdeti mezőben, folyamatos kibocsátás esetén peremfeltételként adjuk meg. Utóbbi esetben a külön peremfeltétel megadása miatt a kibocsátás helyét már az áramlási modell futtatása előtt ki kell jelölni, ami nagy hátrányt jelent, mivel a számítási idő jelentős részét a szélmező előállítás teszi ki. Egyszeri kibocsátás esetén a rendelkezésre álló szélmezőben a megadott kezdeti koncentráció-eloszlásból történő diszperzió szimulációja baleset esetén gyorsan, percek alatt lefuttatható. A tartomány határain, mind az alsó, oldalsó és felső határfelületen Neumann-féle „no-gradient” peremfeltételt, azaz szabad kifolyást és kiülepedést feltételeztünk.

3.5 A modell korlátai

A bemutatott modell a határrétegekre vonatkozó általános elméletet veszi alapul. A planetáris határrétegben kialakuló sajátos viszonyok CFD modellezése jelenleg is aktív kutatás tárgyát képezi (Yamada, 2002; Gartmann et al., 2009). A legjelentősebb korlátozó tényezők:

- a légköri stabilitás figyelembe vétele,
- az anizotróp termikus turbulencia modellezése,
- felszíni viszonyok (felbontásnál kisebb méretű tereptárgyak) hatásának parametrizációja,
- meteorológiai sajátosságok (csapadék, nedvesség, besugárzás) beépítése a modellbe.

A neutrálistól eltérő hőmérsékleti rétegződés esetén a (16–17) egyenletek módosításához a Monin–Obukhov-elmélet áll rendelkezésre (Práger, 1982). Mivel azonban a CFD modellek tartományának magassága mindössze 100 m nagyságrendű, a stabilitásra, valamint a felhőzetre és a sugárzási viszonyokra vonatkozó adatokat külső forrásból kell beépíteni a modellbe. A felszín hatására, kis magasságban kialakuló hőmérsékleti gradiensek a (11) egyenleten keresztül a turbulenciaviszonyokban okoznak változást. A méretskála növelésével a turbulencia anizotróp tulajdonsága egyre jelentősebbé válik, köszönhetően a felhajtóerőből származó termikus turbulencia irányfüggő – vertikális – jellegének. Anizotróp turbulencia esetén a k - ε modellek alkalmazhatósága az izotróp turbulens viszkozitás fogalmának bevezetése miatt korlátozott, ezért az általunk választott mikrometeorológiai tartomány a legnagyobb méretskála, ahol a k - ε modellek alkalmazásaival találkozunk. Alternatívaként az ún. „Reynolds-Stress”, RSM turbulenciamodellek különböző változatait használják, önállóan és a meglévő modellek kiegészítéseként is (Davidson, 1997). A jelenlegi fejlesztések fő iránya a *Large Eddy Simulation* (LES) technológia, amely a nagy skálájú (irányfüggő) és a kis skálájú (izotróp) turbulencia szétválasztásával egyesíti a kétféle megközelítés előnyeit (Cheng and Liu, 2011).

3.6 Utófeldolgozás, megjelenítés

A kapott eredményeket az OpenFOAM saját megjelenítőjével, a *ParaView* nevű szoftverrel ábráztuk. A szoftver képes háromdimenziós képek és metszetek készítésére is. Az OpenFOAM előnye, hogy a számszerű eredményeket egyszerű szöveges fájlokban tárolja, így azok könnyen kinyerhetők további feldolgozás céljára. Az eredmények értékeléséhez több programot hoztunk létre, amelyek a különböző bemenő adatokkal történő futtatások eredményeinek összehasonlítását teszik lehetővé.

A „*pontra_interpolal*” nevű program tetszőleges számú (x y z) koordinátájú rácspontra átlagolja az adott rácspontot körülvevő nyolc cellában kapott sebességértékeket. A program előnye, hogy tetszőleges rácsfelbontás mellett is alkalmazható, így a különböző felbontással történő futtatások eredményeinek összehasonlítását is lehetővé teszi.

A „*mezokivonas*” nevű program két azonos számú cellát tartalmazó rácson kapott eredménymezőt von ki egymásból. A különbségmezők a két futtatás bemenő adatainak eltérése által okozott hiba becslésére és jellemzésére alkalmasak. A program a teljes tartományra, illetve a 2 és 10 méteres szintre vonatkozó átlagos eltérést is számítja a két szélmező között, ami módot ad az eredmények közötti eltérés számszerű bemutatására. A „*szintre_atlagol*” elnevezésű rutin adott magassági szintre átlagolja a paraméterek értékeit, összehasonlító vizsgálatokat téve ezzel lehetővé.

4. A modell paramétereinek beállítása

4.1 Az optimális rácsfelbontás kiválasztása

Mint azt korábban bemutattuk, a rács típus és -felbontás megválasztása jelentősen befolyásolhatja a kapott eredményt. Szakirodalmi források rámutatnak, hogy a rácsválasztásból adódó hiba számszerűen becsülhető, és annak értéke a modelleredményekkel együtt közlendő (Hefny and Ooka, 2008). Ennek érdekében 21 különböző felbontás mellett futtattuk a modellt azonos geometria, valamint kezdeti és peremfeltételek mellett. A felbontások összehasonlíthatósága érdekében minden esetben 2800 iterációs lépés után értékeltük ki az eredményeket, így a finomabb felbontású modellek arányosan több ideig futhattak. A bemenő meteorológiai adatok a függelékben megtalálható alapértelmezett értékek voltak.

Gyakran találkozunk azzal a problémával, hogy a számítási igény csökkentése érdekében rontanunk kell a felbontás minőségét. Ha ez szükségessé válik, a függőleges irány kitüntetett jellege miatt a meteorológiai problémáknál több lehetőséget kell számba venni aszerint, hogy melyik okozza a legkisebb számítási hibát:

- a vízszintes felbontás csökkentése;
- a függőleges felbontás csökkentése a felszín közelében;
- a függőleges felbontás csökkentése egyenletesen az egész modelltartományban;
- a függőleges felbontás csökkentése a magas szinteken;
- a modelltartomány felső szintjeinek elhagyása.

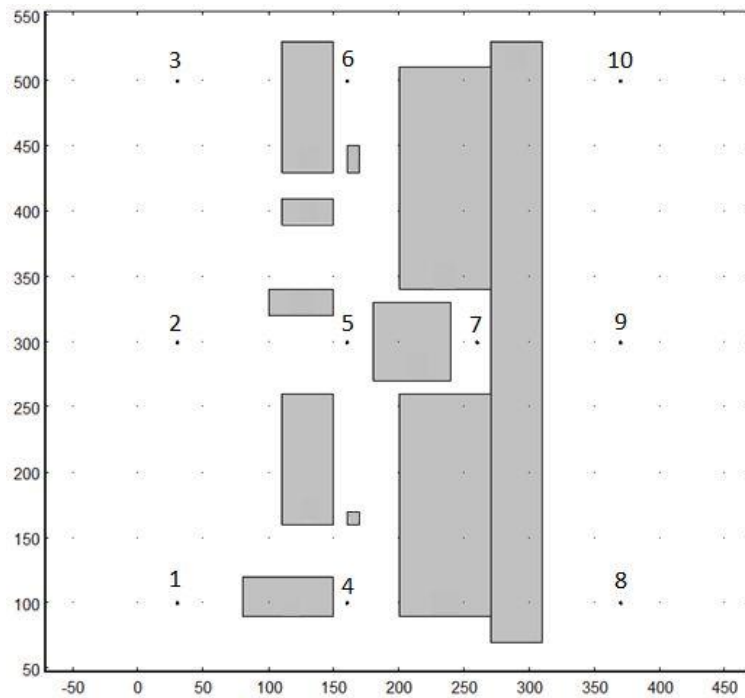
Vizsgálatunkkal választ kerestünk arra, hogy a fentiek közül mely változtatás okozza a legkisebb hibát. A kiválasztott rácsokat a 2. táblázatban mutatjuk be. A modelltartomány vízszintes irányban minden esetben 400 x 600 m méretű volt. Az A2C-vel szerzett tapasztalatok alapján (Leelőssy, 2010) a vízszintes felbontást 5 és 10 m, a függőleges felbontást 0,5 és 2 m között változtattuk, a modelltartomány tetejét pedig 60 m, illetve 120 m magasságban állítottuk be. A modell számítási igénye a cellák számától függ, ezért az eredményeket az adott rácshoz tartozó teljes cellaszám függvényében ábrázoljuk. A 21 futtatásból három instabillá vált, ezeket a 2. táblázatban dőlt betűvel jelöltük. A 2 m vízszintes felbontású modellfuttatás az általunk használt kétmagos, 2,6 GHz órajelű processzoron nem futott le reális idő alatt, így ott sem kaptunk értékelhető eredményt.

Referenciaként a legfinomabb felbontású, a 2. táblázatban félkövéren jelölt rácsot használtuk.

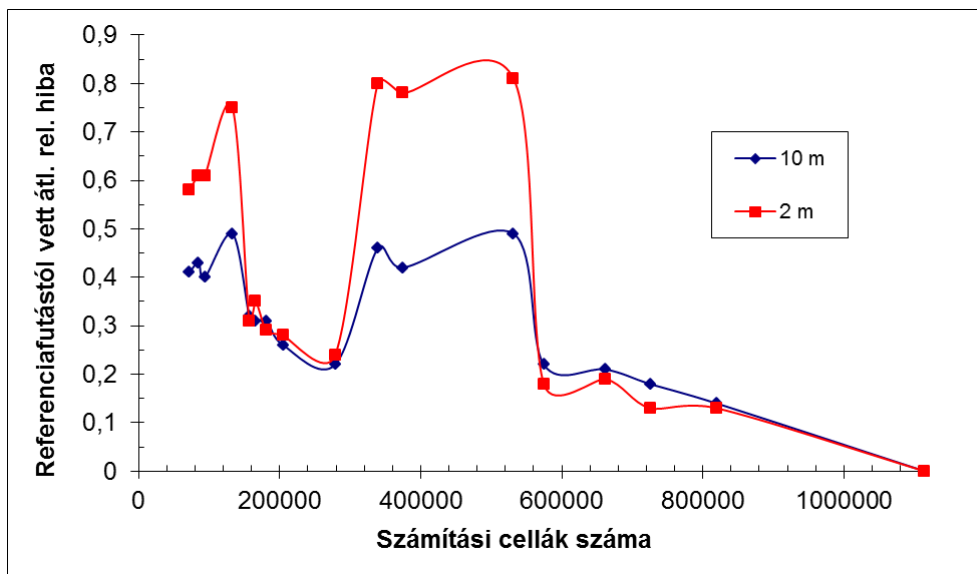
2. táblázat: a vizsgált rácsok tulajdonságai. A félkövéren jelölt rácsot használtuk referenciának, a dőlt betűvel jelölt futtatások instabillá váltak.

<i>Vízszintes felbontás [m]</i>	<i>Függőleges felbontás a felszín felett [m]</i>	<i>Függőleges felbontás a magasban [m]</i>	<i>Függőleges felbontás váltásának magassága [m]</i>	<i>A modelltartomány teteje [m]</i>	<i>Cellák száma</i>
10	1	2	12	60	71 646
10	1	2	30	60	84 746
10	0,5	2	12	60	93 570
10	0,5	2	30	60	132 870
<i>10</i>	<i>1</i>	2	<i>12</i>	<i>120</i>	<i>143 586</i>
10	1	2	30	120	156 686
10	0,5	2	12	120	165 510
10	1	2	60	120	181 318
10	0,5	2	30	120	204 810
10	0,5	2	60	120	278 706
5	<i>1</i>	2	<i>12</i>	60	<i>286 584</i>
5	1	2	30	60	338 984
5	0,5	2	12	60	374 280
5	0,5	2	30	60	531 480
5	1	2	12	120	574 344
5	<i>1</i>	2	<i>30</i>	<i>120</i>	<i>626 744</i>
5	0,5	2	12	120	662 040
5	1	2	60	120	725 272
5	0,5	2	30	120	819 240
5	0,5	2	60	120	1 114 824
2	1	2	30	120	3 917 150

Az eredményeket 20 kiválasztott pontra interpoláltuk, és az ott mérhető szélsőbességeket a cellaszám függvényében ábrázoltuk. A kiválasztott pontok helyét a 8. ábra mutatja, minden pontban két szinten, 2 és 10 m magasságban hasonlítottuk össze a szélsőbességeket. A sebességek referenciafutástól vett átlagos eltérését a 9. ábra mutatja a 10, illetve 2 méteres magasságon vett 10–10 pontra átlagolva.



8. ábra: a vizsgált terület alaprajza és a különböző rácsok összehasonlításához kiválasztott pontok helye. Minden pontban 2 és 10 m magasságban hasonlítottuk össze a szélességeket.



9. ábra: a kiválasztott pontokban (8. ábra) 2 és 10 méteren mért szélességek referenciafutástól vett átlagos relatív eltérése a cellák számának függvényében.

Az 9. ábrán a felbontás egyenletes finomítása esetén egy monoton csökkenő görbét várnánk. Esetünkben azonban látható, hogy a cellák számának növelésével nem feltétlenül közelítünk a legfinomabb felbontású referenciafutás eredményéhez.

A körülbelül 200 000 cellát tartalmazó rácsok a náluk kevésbé nagyobb számítású igényű futásoknál lényegesen jobb eredményt mutattak, és alig tértek el a háromszor több cellát tartalmazó rácsokon kapott eredményektől. Az ezekhez a pontokhoz tartozó rács típusok elemzésével megállapíthatjuk, hogy a vertikális felbontás finomítása a felszín felett elsődleges fontosságú, és lényegesen nagyobb mértékben javítja a modell megbízhatóságát, mint a vízszintes felbontás javítása. Ezt az eredményt a határrétegben fellépő nagy szélnyírással, valamint a felszín közelében fellépő turbulencia jelentőségével magyarázhatjuk. Ezek pontos modellezése még a számítású cellák oldalai közötti arány jelentős eltorzulása árán is elsődleges fontosságú.

A 60 m magasságú rácsok igen rosszul szerepeltek, annak ellenére, hogy a két kémény kivételével az épületek mindegyike ennél alacsonyabb, és a vizsgálatot csak a felszínközeli 2, illetve 10 méteres szélmezőre végeztük el. Megállapíthatjuk, hogy a modell tartomány 120 m magasságig történő kiterjesztése a felszín közelében kialakuló szélviszonyok modellezését is nagymértékben javítja. A vizsgálat alapján a számítású igény és a megbízhatóság szempontjából optimális rács vertikálisan az épületek többségének magasságáig (30 m) finom, mindössze 50 cm-es felbontású, 30 és 120 m között 2 méteres felbontású. A horizontális felbontás 10 m. A kiválasztott rácsot a 6. ábra mutatja, paramétereit a 9. ábrán nyíllal, a 2. táblázatban szürke sávval jelöltük.

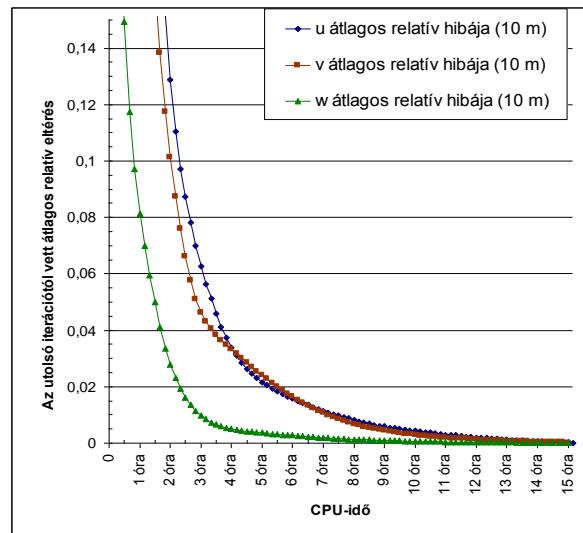
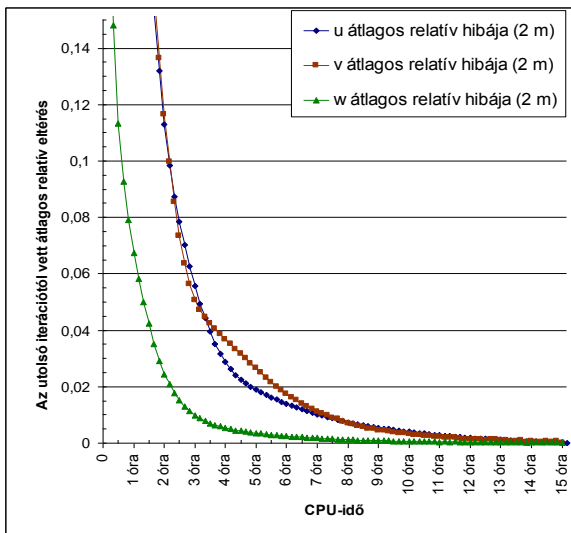
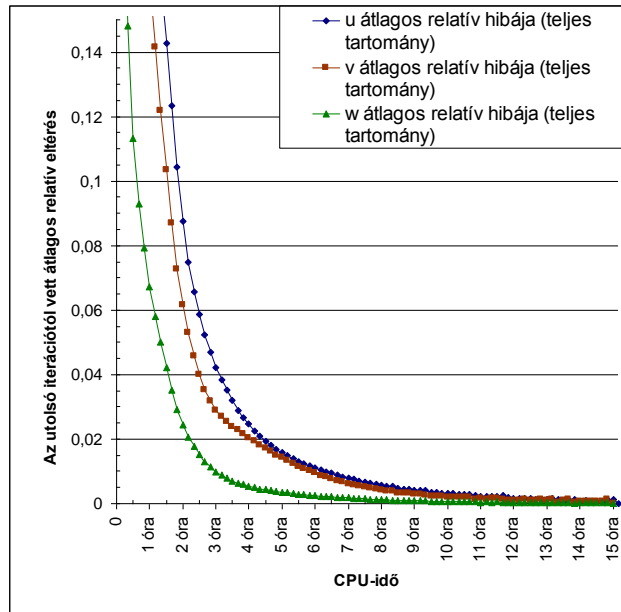
4.2 A konvergencia sebessége

A felbontás kiválasztása után az optimális futási idő meghatározása a feladat. A kiválasztott rácson hosszú, összesen 20 000 iterációs lépésig tartó futtatást végeztünk. A futási idő az általunk használt kétmagos, 2,6 GHz órajelű processzoron körülbelül 15 óra volt. A bemenő paraméterek tíz méteren mért 10 m/s erősségű nyugati szél, valamint 15 °C-os levegő- és felszíni hőmérséklet voltak. CPU-idő szerint mérve tízpercenként kiírtuk az aktuális eredményt, majd az egyes mezőket a „mezokivonas” program segítségével kivontuk egymásból, és meghatároztuk a mezők 2 méteres és 10 méteres szintre, illetve a teljes modelltartományra vonatkozó átlagos relatív eltérését mindhárom szélkomponensre vonatkozóan. Az eredményeket a 10. ábra mutatja, ahol jól látható a függőleges szélkomponens gyors konvergenciája, valamint az, hogy az egyes szintek között kicsi az eltérés a konvergencia sebességében. Az adott számítási pontosság eléréséhez szükséges futási időt a 3. táblázat tartalmazza.

Az iteráció 4. órája után a számítási igény 4%-nál jobb pontosság eléréséhez tartozó növekménye irreálisan hosszúvá válik, ezért későbbi vizsgálatainkban a 4%-os pontosságot biztosító 4 órás futási időt állítottunk be, ami körülbelül 5500 iterációs lépésnek felel meg.

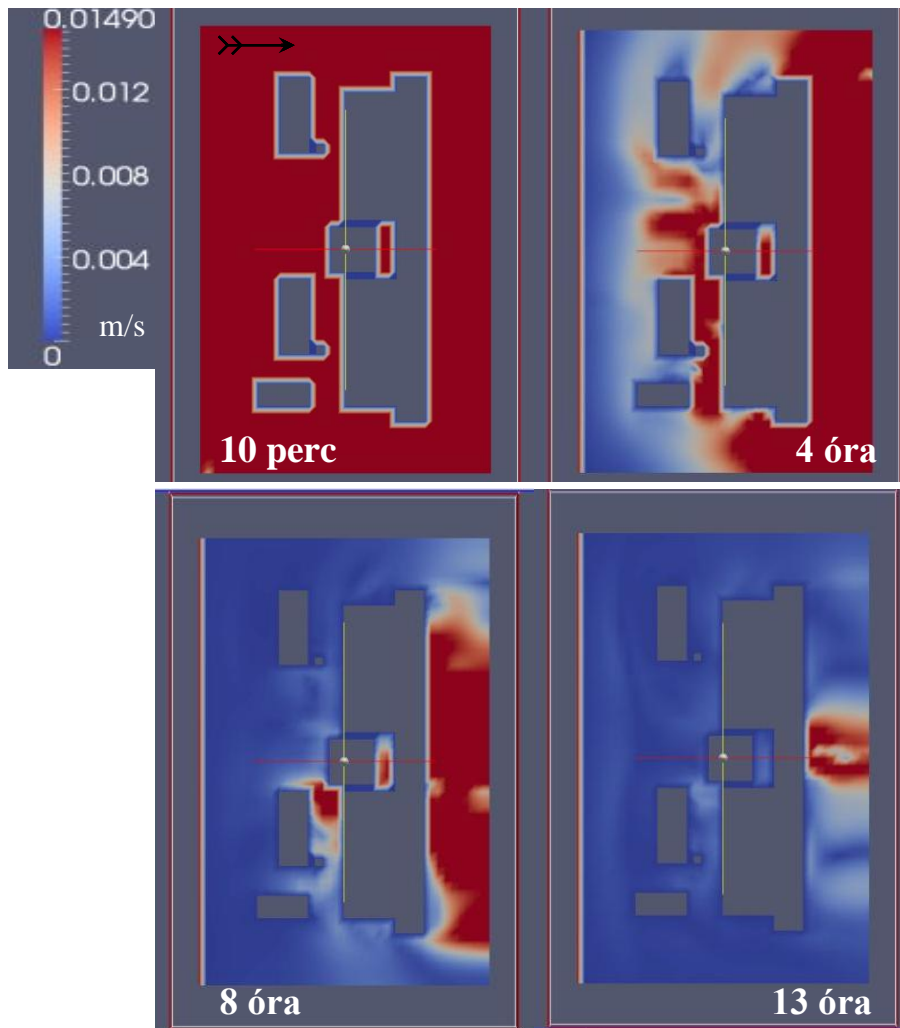
3. táblázat: az adott pontossághoz szükséges futási idő 10 m/s szélesség mellett kétmagos, 2,6 GHz órajelű processzoron. 4%-nál jobb pontosság eléréséhez jelentősen megnő a számítási igény.

<i>Pontosság</i>	<i>CPU-idő</i>	<i>CPU-idő növekménye</i>
10%	2 óra 20 perc	
9%	2 óra 30 perc	+ 10 perc
8%	2 óra 40 perc	+ 10 perc
7%	2 óra 50 perc	+ 10 perc
6%	3 óra 10 perc	+ 20 perc
5%	3 óra 30 perc	+ 20 perc
4%	4 óra	+ 30 perc
3%	4 óra 50 perc	+ 50 perc
2%	6 óra	+ 70 perc
1%	7 óra 30 perc	+ 90 perc



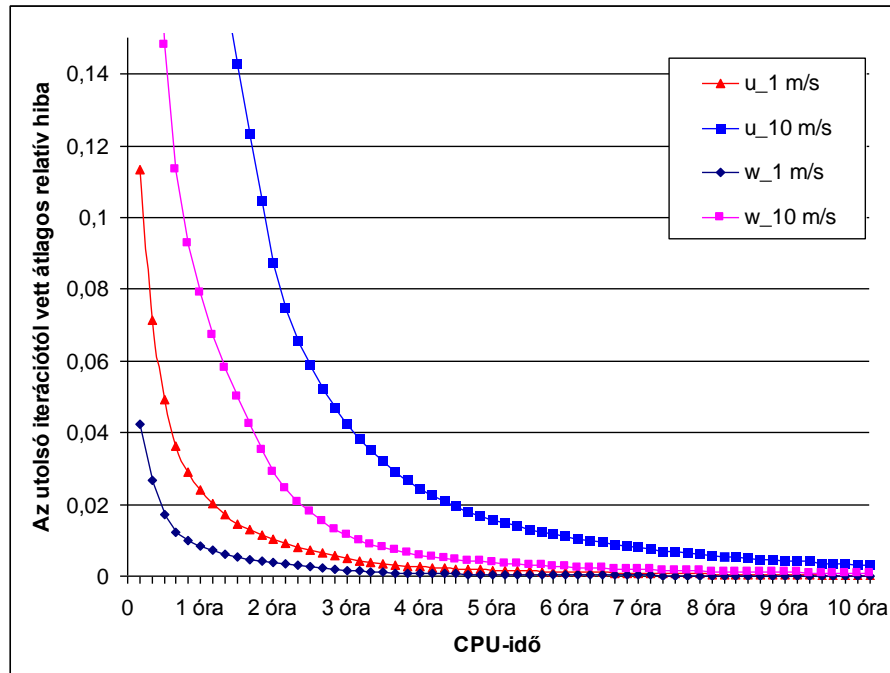
10. ábra: a szélkomponensek utolsó iteráció eredményétől való átlagos relatív eltérése 2 m (balra) és 10 m (jobbra) magasan, illetve a teljes modelltartományon (fent). A felszín közelében és a horizontális szélkomponensek esetében a leglassabb a konvergencia.

A futási idő korlátossága által okozott hibák térbeli eloszlásáról képet kaphatunk, ha a konvergált sebességmezőből kivonjuk az adott iterációs lépés során kapott eredményeket, majd az így kapott különbségi mezőket megjelenítjük. A 11. ábrán a modell futása során 100 percenként kapott sebességmezőknek a végleges mezőtől vett különbségét mutatjuk be. Látható, hogy az épületek szél felőli oldalán a megoldás hamar konvergál, míg a szélárnyékos részekben hosszas iterációra van szükség.



11. ábra: adott CPU-időhöz tartozó iterációs lépés során kapott szélmezők eltérése a végleges eredménytől 10 m/s erejű nyugati szél esetén. A szél felőli oldalon a megoldás gyorsan konvergál, míg a szélárnyékos részekben további iterációra van szükség. A módszer alkalmas a futási idő korlátossága miatti hiba térbeli eloszlásának becslésére.

A konvergencia sebességének szélességtől való függését 1 m/s erejű nyugati szelet feltételezve további futtatásokkal vizsgáltuk. Az eredményeket a 12. ábra mutatja. Az 1 és 10 m/s szélesség mellett történő futtatások közötti különbség igen jelentős, az alacsony szélesség mellett a konvergencia sokkal gyorsabb. A 4%-os pontossághoz negyedével kevesebb, az általunk használt számítógépen mindössze 1 óra hosszú futási időre volt szükség. A függőleges sebességkomponens konvergenciája ebben az esetben is sokkal gyorsabb a horizontális sebességeknél. Az eredmények felhívják a figyelmet arra, hogy a modell futási idejét a szélesség függvényében kell megválasztani, szeles időjárási helyzetekben a konvergenciához szükséges idő jelentősen megnő.

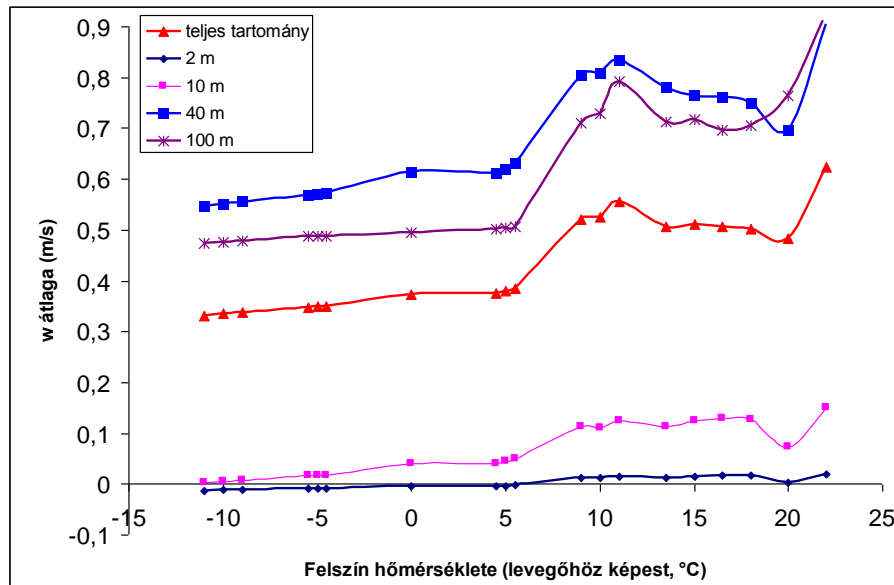


12. ábra: szélkomponensek utolsó iteráció eredményétől való átlagos relatív eltérése 1 és 10 m/s bemenő szélesség esetén. A horizontális szélkomponens lassabban konvergál a vertikálisnál. A szélesség növekedésével a konvergenciához szükséges futási idő jelentősen megnő.

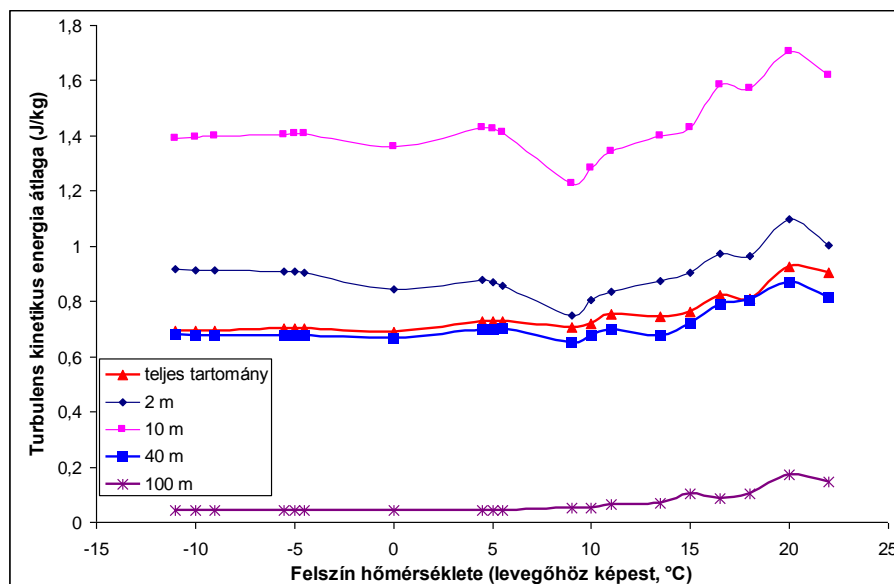
4.3 A modell érzékenysége a felszín hőmérsékletére

A hőmérsékletre vonatkozó alsó peremfeltételt a talajfelszín és az épületek falának hőmérséklete jelenti. Ezeket a nehezen mérhető mennyiségeket a levegő hőmérséklete mellett a felszín tulajdonságai, valamint a sugárzási és szélviszonyok is jelentősen befolyásolják, ezért helyes megadásuk nehézségekbe ütközik. A felszíni hőmérséklet bizonytalanságából származó hiba becslésére szimulációkat futtattunk 10 m/s-os nyugati szelet és a levegő 15 °C-os izoterm hőmérsékletét feltételezve. A felszín hőmérsékletét 5 °C és 35 °C között változtattuk. A felszín felmelegedése, illetve lehülése elsősorban a fel- és leáramlásokat tekintve okoz változást, ezért a függőleges sebességkomponensben tapasztalt eltéréseket vizsgáltuk. A hőmérsékleti rétegződés a (11) egyenleten keresztül a turbulenciaviszonyokat is jelentősen befolyásolja. A függőleges sebességkomponens és a turbulens kinetikus energia adott magassági szintekre, illetve a teljes modelltartományra vett átlagait a 13–14. ábra mutatja. A 13. ábrán látható, hogy a függőleges sebesség a talaj közelében lényegesen kisebb, mint az épületek feletti szinteken. A legerősebb feláramlásokat 40 m magasan, az épületek tetejével körülbelül egy szinten mérhetjük, ami jól mutatja, hogy az épületek által kialakított függőleges sebességek egy nagyságrenddel

nagyobbak lehetnek a felszínközeli, termikus úton kialakuló feláramlásoknál. A felszín levegőhöz képest 5 °C-nál erősebb felmelegedése ugyanakkor a vertikális sebesség ugrásszerű, körülbelül 30%-os növekedését idézi elő az egész modelltartományra vonatkozóan, ami szükségessé teszi a felszíni hőmérséklet változásainak figyelembe vételét.

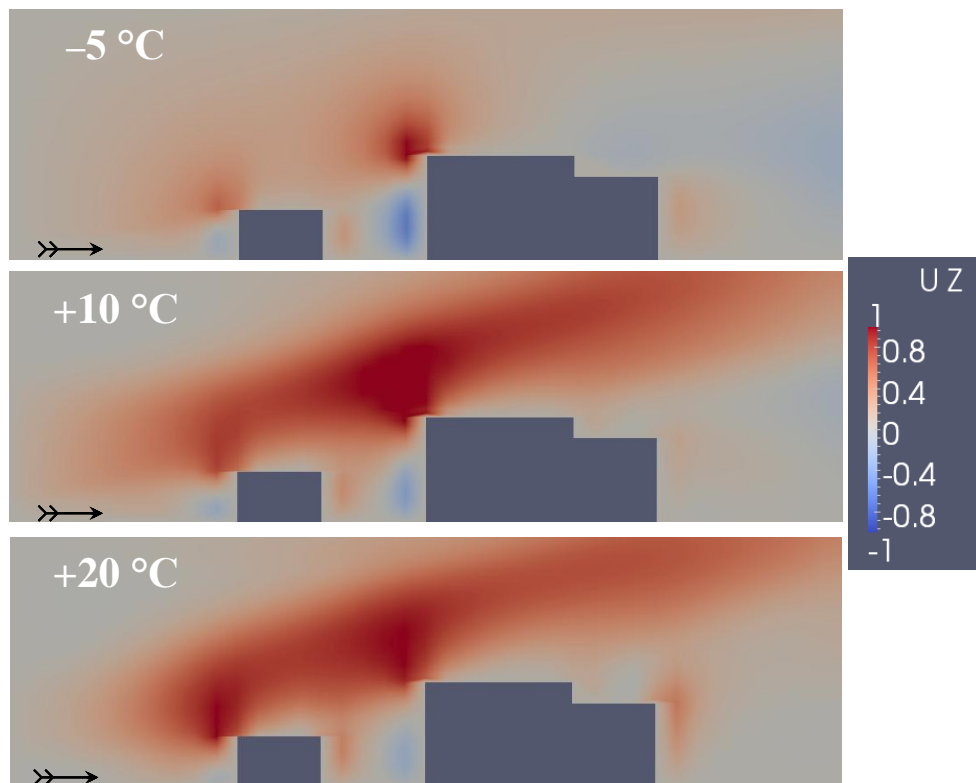


13. ábra: a függőleges szélkomponens adott szintekre és a teljes modelltartományra vett átlagos értékei a felszíni hőmérséklet függvényében, 10 m/s erejű szél mellett. Az épületek felett keletkező feláramlás egy nagyságrenddel nagyobb a felszín közelében kialakuló függőleges sebességeknél.



14. ábra: turbulens kinetikus energia adott szintekre és a teljes modelltartományra vett átlagos értékei a felszíni hőmérséklet függvényében.

A felszín felmelegedésének turbulenciaviszonyokra való hatását a 14. ábrán mutatjuk be. A turbulens kinetikus energia értékei a függőleges sebességhez hasonlóan a levegőhöz képest 5 °C-nál erősebben felmelegedő felszínek felett mutatnak jelentős, de bizonytalan irányú változást. A turbulens kinetikus energia körülbelül 10 m magasságban a legnagyobb. A magas szinteken a turbulens határreégektől való nagy távolság, a felszín közelében a szélesebb rohamos csökkenése okozza a turbulens kinetikus energia alacsonyabb értékeit.



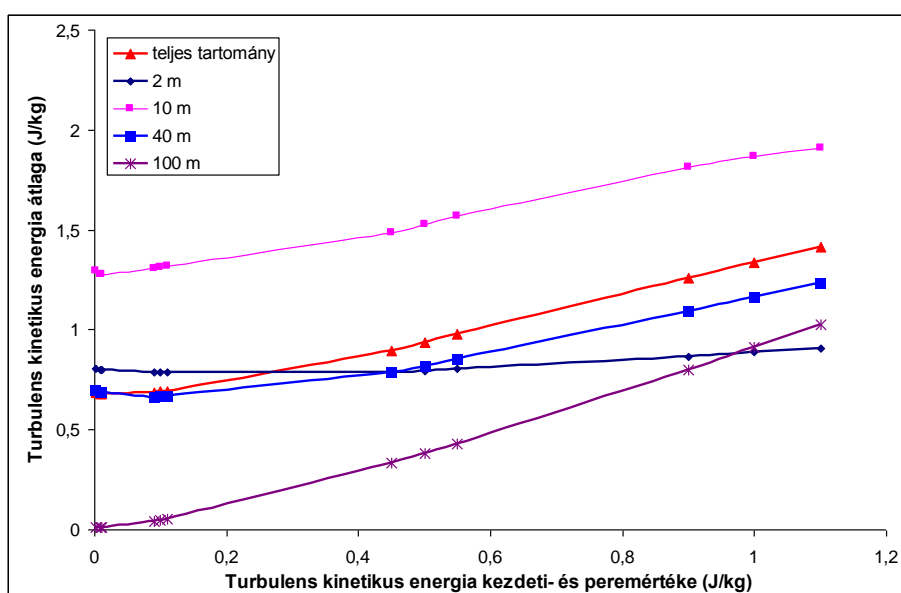
15. ábra: a függőleges szélkomponens értékei (m/s) adott levegőhöz viszonyított felszíni hőmérséklet mellett, nyugat-keleti metszeten. Bemenetként 2 m/s-os nyugati szelet feltételeztünk.

A levegőtől jelentősen eltérő felszíni hőmérsékletek csak alacsony szélességek mellett jöhetnek létre, amikor az áramlási viszonyokat döntően a hőmérsékleti rétegződés befolyásolja. Mivel a felszín hőmérsékletének térben és időben is finom felbontású mérésére nincs mód, az ilyen időjárási helyzetekben a modell alkalmazhatósága korlátozott, és a felszín lehülése vagy felmelegedése okozta bizonytalanság felmérésére lehetőleg különböző bemenő paraméterekre elvégzett többszöri futtatást igényel. Gyenge, 2 m/s erejű szél esetére végzett vizsgálatainkat a 15. ábrán szemléltetjük. Az épületek által kialakított áramlási kép kis magasságokban még a talajfelszín jelentős

felmelegedése esetén sem változik, és bár a konvekció emelő hatása kimutatható, a 2 m/s-os szél mellett még szélsőségesen erős besugárzás esetén sem tekinthető dominánsnak. Az épületek feletti tartományban ugyanakkor a függőleges áramlások sebességében a felszín felmelegedése akár 1 m/s mértékű változást is okozhat.

4.4 A modell érzékenysége a turbulens kinetikus energia bemeneti értékére

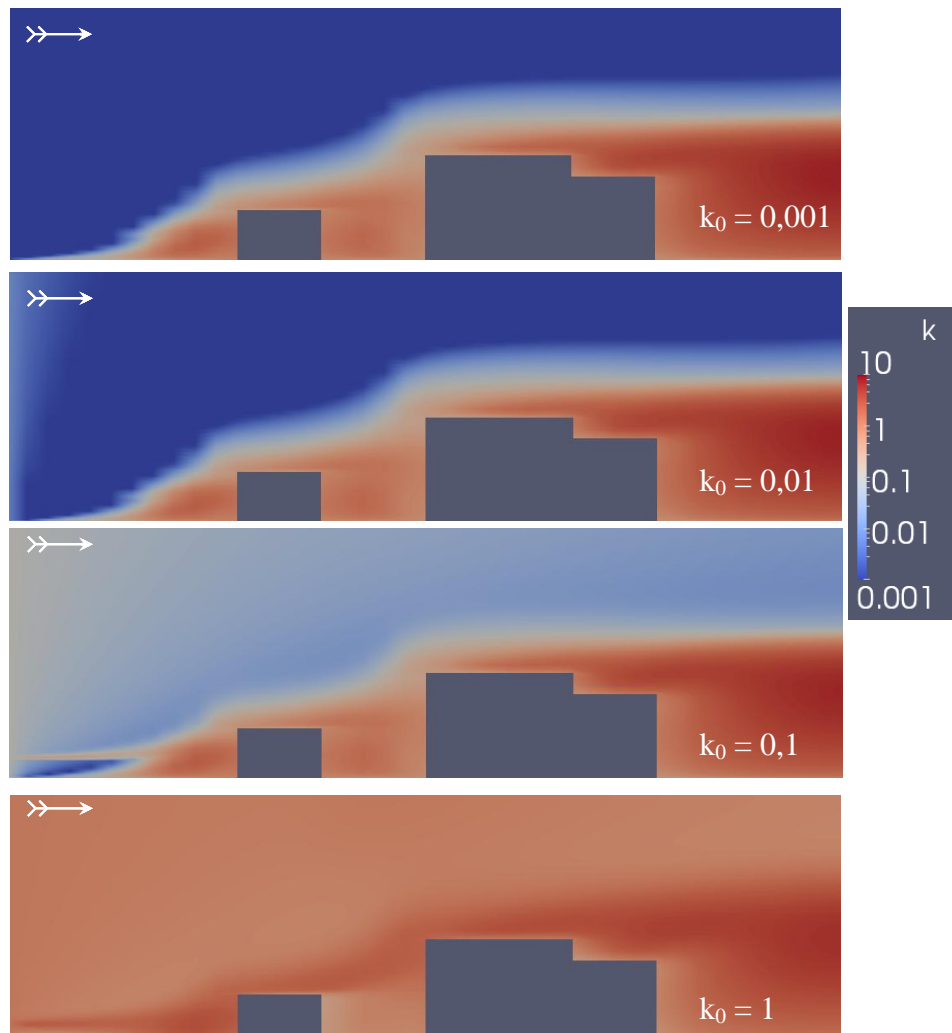
A tartomány szél felőli határain a turbulens kinetikus energiára vonatkozó oldalsó peremfeltétel megadása nem könnyű feladat, mértéke az időjárási helyzettől, a domborzattól és az erőmű környezetében elhelyezkedő tereptárgyaktól is függ. Mivel a turbulens kinetikus energia bemeneti értéke széles skálán változhat, 0,001 és 1 J/kg közötti értékekre végeztünk futtatásokat, hogy megállapítsuk a peremfeltétel hatását a modelltartomány belsejében kialakuló turbulenciaviszonyokra (a 0,001 J/kg-nál kisebb, vagy 1 J/kg-nál nagyobb bemenő paraméterekkel végzett futtatások irreális eredményeket adtak, vagy instabillá váltak). Az összehasonlíthatóság érdekében továbbra is 10 m/s erejű nyugati szél esetére végeztük a futtatásokat.



16. ábra: a turbulens kinetikus energia adott szintre és az egész tartományra vett átlaga az oldalsó peremfeltételként megadott érték függvényében. A felszín közelében az oldalsó peremfeltétel nem befolyásolja jelentősen a turbulenciaviszonyokat.

A 16. ábrán a turbulens kinetikus energia különböző szintekre és a teljes tartományra vonatkozó átlagát mutatjuk be a peremen megadott bemeneti értékének függvényében.

A magasban a turbulencia mértékét döntően a kezdeti- és peremfeltételek befolyásolják, a turbulens kinetikus energia 100 méteres szintre vett átlaga szinte megegyezik a peremfeltételként megadottal. Ugyanakkor a felszínhez közeledve az oldalsó peremfeltétel egyre kevésbé befolyásolja a turbulenciaviszonyokat, kis magasságban a határreteg és az épületek mögötti turbulens zóna határozza meg a turbulens kinetikus energia értékeit. A 2 méteres magasságra vonatkozó görbe szinte teljesen vízszintes, azaz az itt mérhető turbulens kinetikus energia egyáltalán nem érzékeny az oldalsó peremfeltételre. Mivel a turbulencia a 10 m körüli magasságban a legerősebb, és a transzportfolyamatokban betöltött szerepe elsősorban a felszín közelében jelentős, az oldalsó peremfeltételben rejlő bizonytalanság nem okoz nagy hibát a modell eredményeiben.



17. ábra: a turbulens kinetikus energia értékei (J/kg egységekben) nyugat-kelet irányú metszeten, adott k_0 oldalsó peremfeltétel mellett. Nagy magasságokban a peremfeltétel dominál, az épületek és a felszín közelében azonban a hatása nem jelentős.

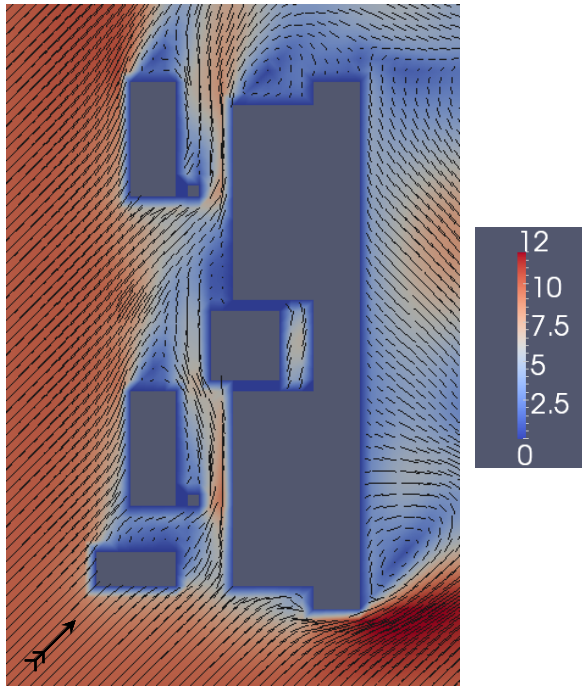
A 17. ábrán bemutatott futtatások alapján az épületek mögött kialakuló turbulens zónában a turbulens kinetikus energia az oldalsó peremfeltétel értékétől függetlenül 1 J/kg nagyságrendű. Az épületek feletti tartományban a 0,01 J/kg feletti bemenő értékek a modellfutás során kis mértékben csökkennek, disszipálódnak. Ez alapján a turbulens kinetikus energiára vonatkozó peremfeltételt 0,001 – 0,01 J/kg között állítjuk be.

5. Szennyezőanyag-terjedési szimulációk

5.1 A turbulens diffúziós együttható megadása

A stacionárius szélmező ismeretében tetszőleges pontban kibocsátott szennyezőanyagok terjedésének szimulációjára van lehetőség a (14) terjedési egyenlet sebességmezőével azonos rácson történő megoldásával. A terjedési modul számára az áramlási mezőt a korábbi modelleredmények, a kibocsátási adatokat a felhasználó biztosítja (7. ábra).

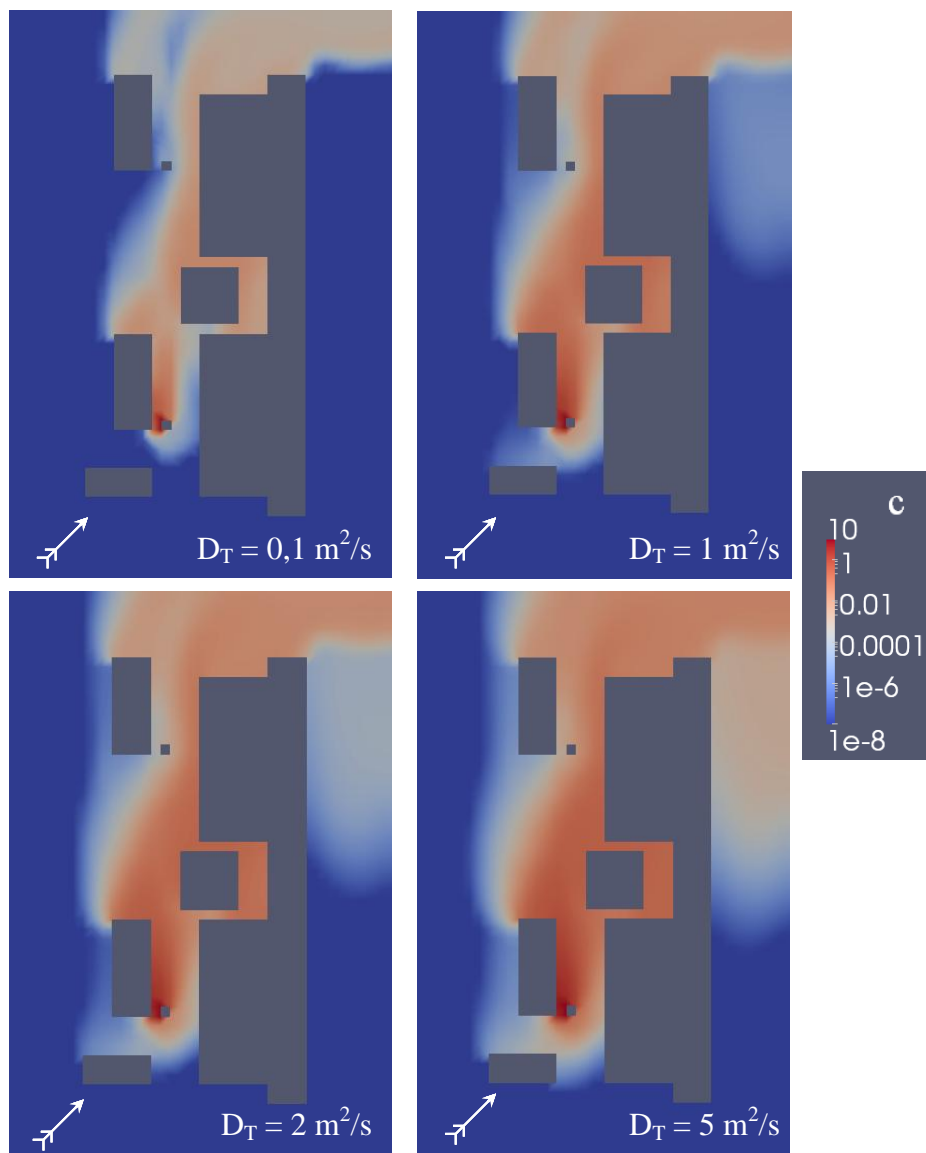
Az egyenletben szereplő D_T turbulens diffúziós együttható értékének megadása nagy fontossággal bír. A terjedési egyenlet megoldásához használt *scalarTransportFoam* modul egy felhasználó által megadott homogén D_T paramétert vesz figyelembe, a (15) egyenlettel definiált turbulens diffúziós együttható azonban egy helyfüggő skalármező. A helyfüggés elhanyagolása által okozott hibát szimulációk futtatásával becsültük. Mivel a Schmidt-szám légköri CFD problémákban alkalmazott irodalmi értéke 0,9 (Baik et al., 2003), a modell által számított turbulens viszkozitásével azonos, 0,1 – 1 m²/s nagyságrendű D_T értékeket választottunk. Peremfeltételként 10 m magasan 10 m/s erősségű délnyugati szelet feltételeztünk, az áramlási mező kibocsátás magasságában (10 m) vett metszetét a 18. ábra mutatja.



18. ábra: 10 m/s erejű délnyugati szél esetén kialakuló áramlási mező (színskála m/s egységekben) a Paksi Atomerőmű területén, 10 m magasságban.

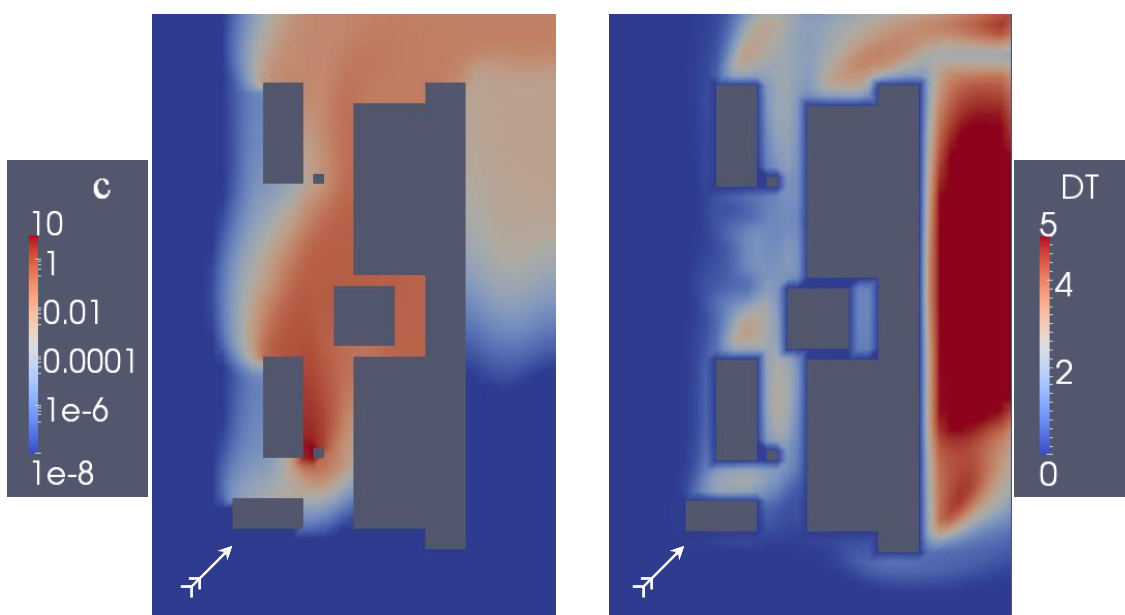
A 18. ábrán megfigyelhető, hogy a délnyugati szél az észak-déli tájolású épületek hatására déli irányba fordul, és az épületek közötti szűk csatornában felerősödik. Ez a hatás elősegíti az erőmű csarnoképületektől nyugatra eső üzemi területén kibocsátott szennyezőanyagok észak-déli irányba történő gyors advekciónak. A déli kéménynél 10 m magasságról történő folyamatos kibocsátás esetén kialakuló koncentrációmezőt a 19. ábrán szemléltetjük. A 100 1/m^3 intenzitású kibocsátás kezdete óta eltelt idő az ábrákon egységesen 10 perc, a metszetek a 10 m magasságú szintre vonatkoznak.

A 19. ábrán látható, hogy a turbulens diffúzió az advekciónak domináns helyzetben, nagy szélesség (10 m/s) esetén is jelentős mértékű, különösen az épületek mögötti turbulens zónában. Az eredmények jól mutatják, hogy a paraméter kis megváltoztatása is látványos hatással bír a terjedési viszonyokra. Ugyanakkor mivel a turbulens diffúziós együttható a (15) és (12) egyenleteken keresztül közvetlenül a turbulens kinetikus energiával van összefüggésben, ezért az épületek szél felőli és szélárnyékos oldala között akár több nagyságrendnyi eltérés is lehet az értékében (17. ábra). Ez elengedhetetlenné tette a modell módosítását, a paraméter helyfüggésének figyelembe vételét. Ehhez a *scalarTransportFoam* forráskódjának módosítására volt szükség a 3.3 fejezetben bemutatottak szerint.



19. ábra: 10 m magasan vett koncentráció-eloszlás különböző turbulens diffúziós együtthatók mellett a 18. ábrán látható szélmezőben, a déli toronyból történő folyamatos kibocsátás kezdete után 10 perccel. A turbulens diffúziós együttható megválasztása nagy hatással van a terjedés alakulására.

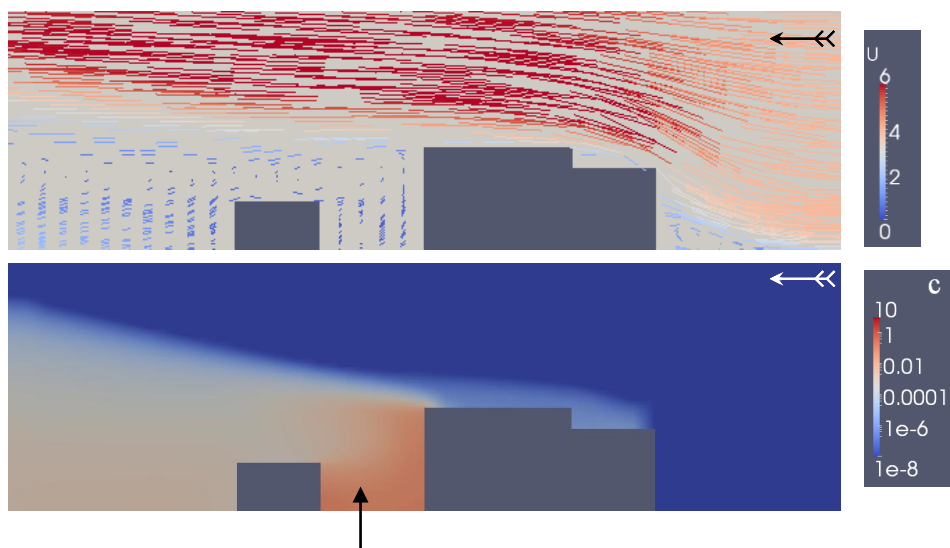
A helyfüggő turbulens diffúziós együtthatót alkalmazva a 18–19. ábrán bemutatott futtatásokkal azonos helyzetben kialakuló koncentrációmezőt a 20. ábra mutatja (10 m/s erejű délnyugati szél mellett, a folyamatos kibocsátás és a metszet magassága egyaránt 10 m, a kibocsátás kezdete óta eltelt idő 10 perc). A diffúziós együttható térbeli eloszlását ábrázolva jól megfigyelhető az épületek mögötti turbulens zóna, ahol az alacsony szélesség és az erős turbulens átkeverődés hatására a terjedés a széliránnyal szemben is megvalósul.



20. ábra: 10 m magasan vett koncentráció-eloszlás (balra) és a turbulens diffúziós együttható térbeli eloszlása (jobbra, m^2/s) a 18–19. ábrán bemutatottakkal azonos feltételek, délnyugati szél mellett. Az épületek mögötti szélárnyékos zónában a turbulencia a széliránnyal szemben történő terjedést is lehetővé tesz.

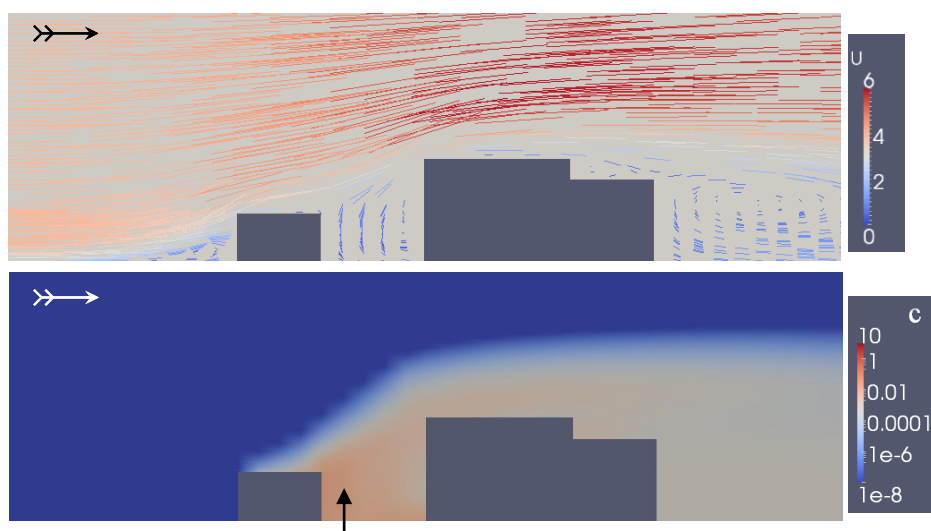
4.2 Szennyezőanyag-terjedési vizsgálatok különböző szélirányok esetén

Az előző fejezetben láttuk, hogy a terjedés szempontjából nagy fontosságú, hogy a felszín közelében történő kibocsátás az épületek szél felőli, vagy szélárnyékos oldalán helyezkedik el. A szél felőli oldalon az advekciónak a transzport dominál, amelynek irányát a bemenő szélirány és az épületek között kialakuló szélcsatorna-hatás együttesen alakítja ki. A szélárnyékos oldalon azonban elsősorban a turbulens diffúzió határozza meg a terjedési viszonyokat. Mivel a Paksi Atomerőmű legnagyobb épülete az üzemi terület keleti irányba lezáró észak-déli irányítású, 40 m magas csarnoképület (18. ábra), a terjedési viszonyokban a keleti és nyugati szélirányok közötti eltérés vizsgálatára futtattunk szimulációkat. A feltételezett baleset során a déli kéménynél 10 m magasan történő folyamatos, 100 l/m^3 erősségű kibocsátást és 4 m/s szélereősséget feltételeztünk. A 21. ábra a keleti szél esetén kialakuló áramlást és koncentrációmezőt mutatja a folyamatos kibocsátás kezdete után 10 perccel. Az épületek mögötti turbulens zónába kijutó szennyezőanyagok a szélárnyékos területen dúsulnak fel, és az épület fala mentén az áramlással szemben is átkeverednek.

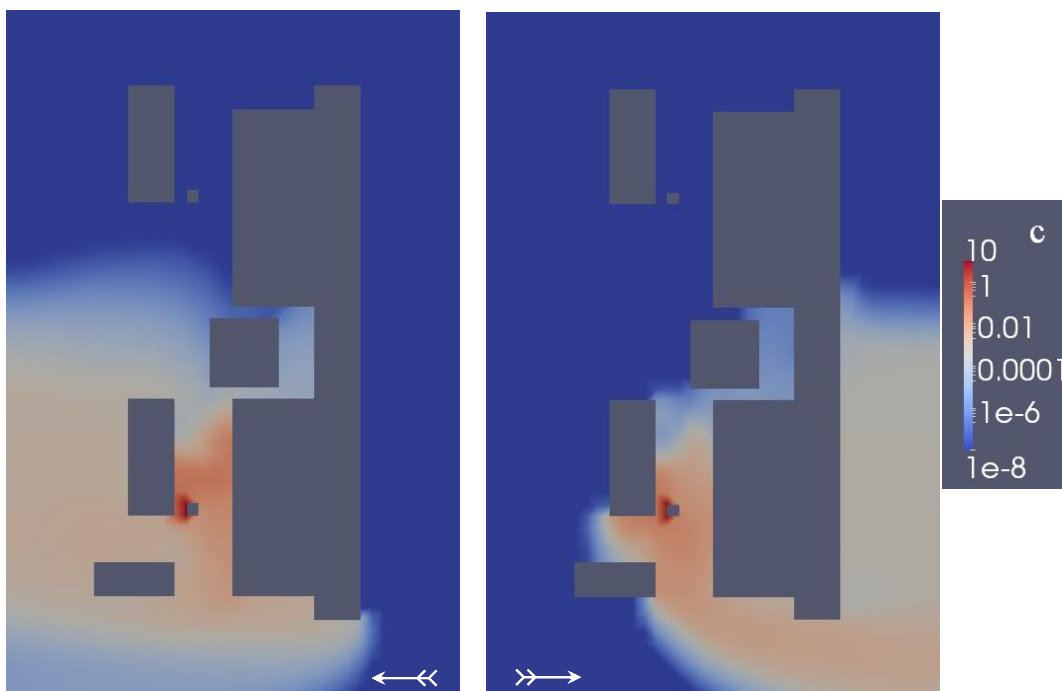


21. ábra: a szélmező (fent, m/s) és a koncentráció-eloszlás (lent) nyugat-kelet irányú metszete 4 m/s erejű keleti szél esetén. A kibocsátás helyének metszetre eső vetületét nyíl jelöli. A szélárnyékos területeken alakulnak ki a legmagasabb koncentrációk.

A 22. ábrán a keleti szélre vonatkozó esettel azonos kibocsátási paraméterek mellett a nyugati szélben kialakuló koncentrációmezőt ábrázoltuk. Az épület falai mentén az áramlással szemben történő diffúzió itt is megfigyelhető. A felszínen kialakuló koncentráció azonban ebben az esetben sokkal alacsonyabb, az épületek előterében kialakuló feláramlások elszállítják a felszín közeléből a szennyezőanyagokat. Az ábrán jól megfigyelhető a csarnoképület szélárnyékos oldalán kialakuló ún. „downwash” hatás, ahol a turbulens örvények a szennyezett levegőt újra a felszín közelébe juttatják.

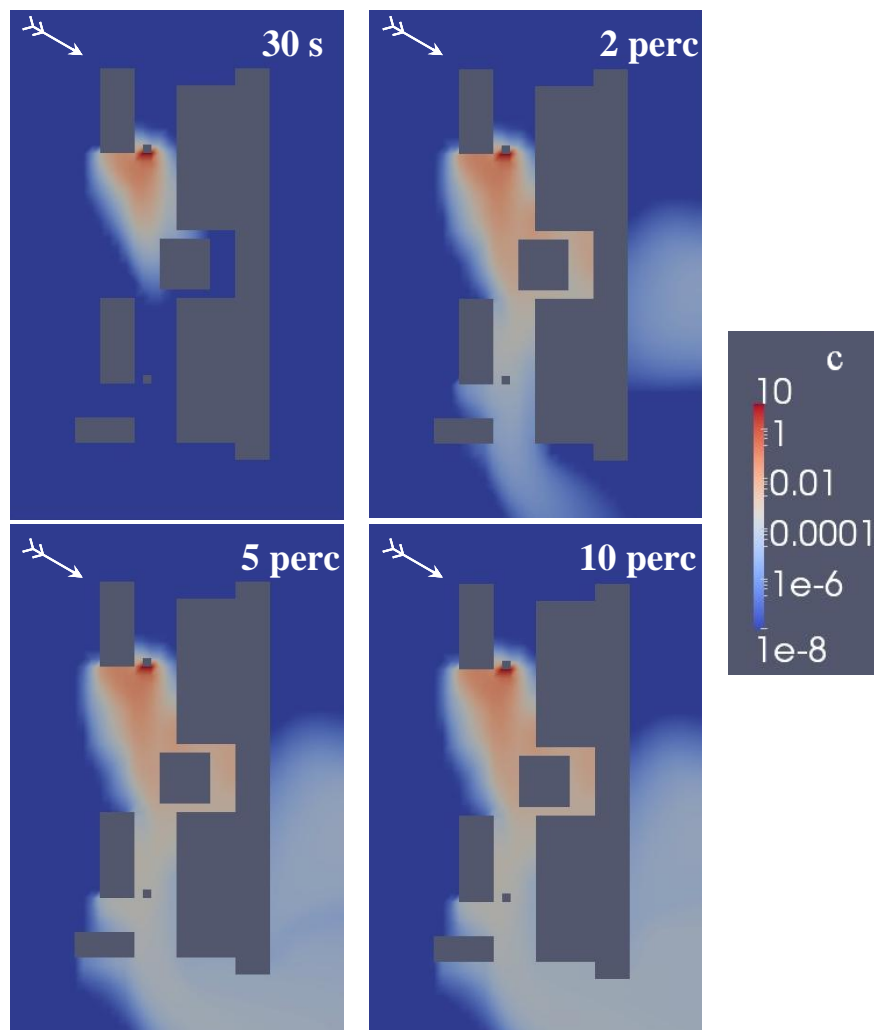


22. ábra: a szélmező (fent, m/s) és a koncentráció-eloszlás nyugat-kelet irányú metszete 4 m/s erejű nyugati szél esetén. A kibocsátás helyének metszetre eső vetületét nyíl jelöli. Az épületek mögötti turbulens örvények visszajuttatják a felszín közelébe a szennyezőanyagokat.



23. ábra: a koncentráció-eloszlás kibocsátás magasságában (10 m) vett metszete 4 m/s erősségű keleti (balra) és nyugati szél (jobbra) esetén, a déli kéményből történő folytonos kibocsátás mellett. A turbulens átkeveredés az előbbi esetben sokkal jelentősebb.

A 23. ábrán a keleti és nyugati szél esetén, a fentiekkel azonos kibocsátási paraméterek mellett kialakuló koncentrációmező vízszintes metszete látható a kibocsátás magasságában, 10 méteres szinten vett metszeten. A szélirányra merőlegesen és azzal szemben történő átkeveredés a keleti szél esetén sokkal jelentősebb. Az épületek elhelyezkedése és a bemutatott eredmények alapján elmondhatjuk, hogy a keleti szélirány mellett van a legnagyobb esélye a szennyezőanyagok feldúsulásának az erőmű üzemi területein.



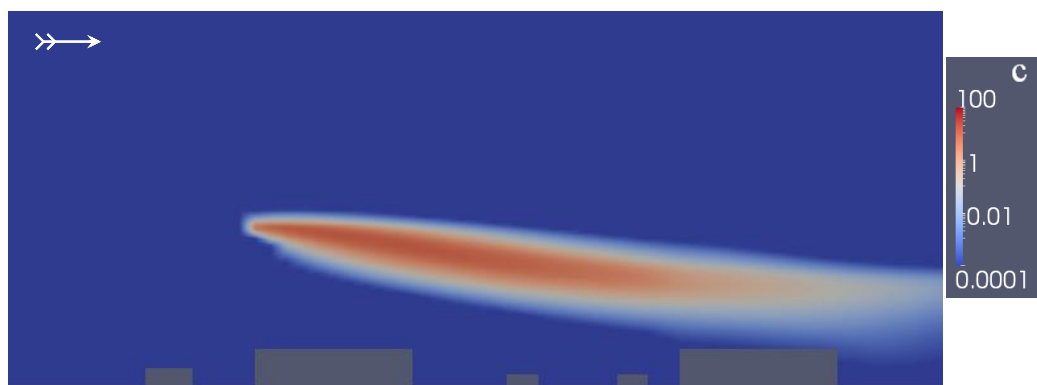
24. ábra: a koncentráció-eloszlás kibocsátás magasságában (10 m) vett metszete 6 m/s erősségű északnyugati szél esetén, az északi kéményből történő folytonos kibocsátás kezdete óta eltelt idő függvényében.

A leggyakrabban előforduló északnyugati szélirány esetére futtatott szimulációt a 24. ábrán mutatjuk be. A feltételezett baleset az északi kémény mellett 100 1/m^3 erősségű folyamatos kibocsátással járt, a szélesebességet 6 m/s -nak vettük. Az épületek észak-déli tájolása az északnyugati szelet északi irányba fordítja, az így kialakuló szélcsatornában a szennyezőanyagok hamar nagy távolságra advektálódnak. A terjedést az advekció dominálja, a szélirányra merőleges turbulens átkeveredés gyenge, széllel szemben pedig a 23. ábrán látható eredményekkel ellentétben szinte egyáltalán nem halad a csóva. A turbulens diffúzió az épületek keleti oldalán válik jelentőssé, ahol a „downwash” hatásnak köszönhetően már a kibocsátás kezdete után 2 perccel megjelenik a szennyezett csóva.

4.3 Esettanulmány: a 2003-as paksi üzemzavar

A Paksi Atomerőműben 2003. április 10-én bekövetkezett üzemzavar során radioaktív nemesgázok jutottak a reaktorcsarnok légterébe, majd a szellőzőkéményeken keresztül a környezetbe. Mivel a radioaktív gázok a 100 m magas kéménypáron keresztül jutottak a szabadba, terjedésüket több tíz kilométeres méretskálán szimulálták. A kibocsátás környezeti hatásait mérések és modelleredmények alapján is becsülték (OAH, 2003). Az általunk vizsgált lokális skálán a modellfuttatások célja annak megállapítása, hogy a szennyezőanyag-csóva milyen mértékben keveredhetett le a felszínre az erőmű üzemi területén. Mivel a kibocsátás 100 m magasan történt, a modell felső határát kiterjesztettük 240 méteres magasságig.

A nemesgáz-kibocsátás április 10-én késő este kezdődött, értéke 23 órakor 600 GBq/m^3 volt (OAH, 2003). A baleset idején Pakson 3–4 m/s erejű déli szél fújt, az éjszaka első felében gyenge eső esett. A levegő hőmérséklete 23 órakor $10 \text{ }^\circ\text{C}$ volt, az eső hatására a felszín valószínűleg ennél jobban lehűlt, hőmérsékletét $5 \text{ }^\circ\text{C}$ -nak becsültük. A borult ég és a mérsékelt erejű szél megakadályozta az alsó légrétegek intenzív hűlését, ami kedvezett a csóva lekeveredésének. A kibocsátott gázok levegőénél nagyobb sűrűségét $-5 \text{ }^\circ\text{C}$ -os kimeneti hőmérséklet megadásával vettük figyelembe. A kapott koncentrációmező függőleges metszetét a 25. ábra mutatja.



**25. ábra: a Pakson bekövetkezett üzemzavar során 100 m magasságból kibocsátott szennyezőanyagok terjedésének szimulációja. A csóva megközelíti a földfelszínt.
(Koncentráció GBq/m^3 egységekben.)**

A 25. ábrán látható, hogy a nemesgázok nagyobb sűrűsége és a levegőnél hidegebb felszín hatására a szennyezőanyag-csóva megközelíti a földfelszín. A logaritmikus skálát figyelembe véve azonban megállapíthatjuk, hogy az épületek magasságában megjelenő koncentráció a kibocsátás közelében mérhető értékeknél 5–6 nagyságrenddel kisebb.



26. ábra: a koncentrációmező (GBq/m^3) 2 m magasságban vett metszete a 2003-as paksi üzemzavarra futtatott szimulációk alapján. A kibocsátott gázok igen alacsony koncentrációban érték el a felszín, a modell bizonytalansága meghaladja a kapott értékeket.

A felszínre elérő szennyezőanyag-csóvát a 26. ábrán látható 2 m magasan vett vízszintes metszet mutatja. A kapott koncentráció-értékek azonban nagyon alacsonyak, a modellben rejlő bizonytalanság mértéke ezeket meghaladja, ezért a számszerű eredmények kevésbé relevánsak. Összességében megállapíthatjuk, hogy a kibocsátott gázok az üzemi területen csak igen kicsi, a modell bizonytalanságánál alacsonyabb koncentrációban érték el a felszín. Megjegyezzük, hogy a kibocsátás első óráiban zajló csapadékhullás okozta leáramlás elősegíthette a csóva felszínre történő lekeveredését.

Összefoglalás

A műszaki célú általános áramlásmodellező (*Computational Fluid Dynamics, CFD*) szoftverek meteorológiai alkalmazása lehetővé teszi a mikroskálájú folyamatok pontos kezelését, az épületek között kialakuló bonyolult áramlási tér megoldását. A dolgozatban szakirodalmi források alapján bemutattuk az OpenFOAM nyílt forráskódú CFD modell alapvető működését és a meteorológiai alkalmazása során felmerülő nehézségeket.

Az épületek geometriájának ismeretében, a meteorológiai adatok alapján az OpenFOAM stacionárius SIMPLE megoldójával szimuláltuk az épületek között kialakuló bonyolult áramlási mezőt. A modell későbbi alkalmazásának előkészítése érdekében vezérlő és adatfeldolgozó programokkal egyszerűsítettük a geometria és a meteorológiai adatok beolvasását, valamint alkalmassá tettük a modellt időzített és online futásra.

Elsődleges célunk a későbbi eredmények megbízhatóságának számszerűsítése és a modell tulajdonságainak jobb megismerése érdekében a rácsfelbontásra, a konvergencia sebességére, valamint a terjedési szempontból meghatározó hőmérsékleti és turbulenciaparaméterekre vonatkozó érzékenységi vizsgálatok elvégzése volt. A modellfuttatásokat a Paksi Atomerőmű üzemi területére végeztük. A vizsgálatok során elért legfontosabb eredmények a következők:

- 21 különböző felbontású rácsra történő modellfuttatás után számszerű becslést adtunk az OpenFOAM futtatása során a rácsfelbontás választásából adódó hibára;
- megállapítottuk, hogy a felszín közelében alkalmazott finom felbontás, valamint az épületek magasságát jelentősen meghaladó függőleges méretű modelltartomány használata elsődleges fontosságú az eredmények megbízhatósága szempontjából;
- a modell konvergenciájának sebességét vizsgálva számszerű becslést adtunk a számítási kapacitás korlátozottságából adódó hibára és az adott pontossághoz szükséges futási időre;
- kimutattuk, hogy a hőmérsékletre vonatkozó alsó, valamint a turbulens kinetikus energiára vonatkozó oldalsó peremfeltételek pontos megadása elsősorban az épületek feletti magasságban kialakuló konvekciót és turbulenciát befolyásolja.

A terjedési szimulációkat az OpenFOAM időfüggő terjedési moduljával végeztük. A turbulens diffúzió pontos modellezése nem volt megvalósítható a program által feltételezett homogén turbulens diffúziós együttható használatával, ezért a program forráskódjának módosításával a turbulens diffúziós együtthatót közvetlenül az áramlási modell által számított mezőkből származtattuk.

A Paksi Atomerőmű üzemi területén feltételezett balesetek esetében különböző szélirányokra elvégzett terjedési szimulációkkal bemutattuk, hogy a Paksi Atomerőmű épületeinek észak-déli tájolása miatt az északias és délies szélirányok esetén a szél által történő advekciónál rövid idő alatt nagy távolságra képes eljuttatni a kibocsátott szennyezőanyagokat. Ugyanakkor az üzemi területet keleti irányból lezáró magas épületek miatt keleti szél esetén a terjedés alakulását a turbulens diffúzió határozza meg. Az ilyen helyzetekben a felszín közelében magasabb koncentrációk alakulhatnak ki, és a diszperzió modellezése is nagyobb bizonytalanságot hordoz.

A Paksi Atomerőmű területére vonatkozó szennyezőanyag-terjedési szimulációk fontos adatokat nyújtanak az üzemben dolgozók védelmére és a baleseti forgatókönyvek pontosítása szempontjából. A dolgozatban bemutatott modell operatív gyakorlatba való bevezetése és további fejlesztése révén a jövőben a baleseti kibocsátások lokális skálán történő terjedésének modellezése pontosabbá válhat.

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm témavezetőimnek, dr. Mészáros Róbertnek és dr. Lagzi István Lászlónak a támogatást és szakmai segítséget, amivel a dolgozat elkészítéséhez hozzájárultak.

Irodalomjegyzék

Baik, J.-J., Kim, J.-J. and Fernando, H.J.S., 2003: A CFD Model for Simulating Urban Flow and Dispersion, *Journal of Applied Meteorology* 42, 1636–1648.

Baklanov, A., 2000: Application of CFD Methods for Modelling in Air Pollution Problems: Possibilities and Gaps, *Environmental Monitoring and Assessment* 65, 181–189.

Brandt, J., Christensen, J. H. and Frohn, L.M., 2002: Modelling transport and deposition of caesium and iodine from the Chernobyl accident using the DREAM model, *Atmospheric Chemistry and Physics* 2, 397–417.

Chang, C-H. and Meroney, R.N., 2003: Concentration and flow distributions in urban street canyons: wind tunnel and computational data, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 91, 1141–1154.

Cheng, W.C. and Liu, C-H., 2011: Large-Eddy Simulation of Flow and Pollutant Transports in and Above Two-Dimensional Idealized Street Canyons, *Boundary Layer Meteorology* 139, 411–437.

Dacre, H.F., Grant, A.L.M., Hogan, R.J., Belcher, S.E., Thomson, D.J., Devenish, B.J., Marengo, F., Hort, M.C., Haywood, J.M., Ansmann, A., Mattis I., and Clarisse, L., 2011: Evaluating the structure and magnitude of ash plume during the initial phase of the 2010 Eyjafjallajökull eruption using lidar observations and NAME simulations, *Journal of Geophysical Research* 116, D00U03, doi: 10.1029/2011JD015608

Davidson, L., 1997: An Introduction to Turbulence Models. *Report 97/2*, Dept. of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden

Dombovári, P., Ranga, T., Nényei, Á., Bujtás, T., Kovács, T., Jobbágy, V., Vincze, Cs., Molnár, F., 2008: Új terjedésszámító szoftver fejlesztése és bevezetése a Paksi Atomerőműnél, *Sugárvédelem* 1, 30–36.

Földi, A., Mészáros, M., Sági, L., Deme, S., Dombovári, P., Szántó, A., Tóth, K., Petőfi-Tóth, K., 2010: Léggöri terjedésszámító szoftverek összehasonlítása, *Sugárvédelem 1*, 33–41.

Franke, J., Sturm, M. and Siebel, C., 2011: Validation of OpenFOAM v1.6x with the German VDI guideline for obstacle resolving micro-scale models, *13th International Conference on Wind Engineering (ICWE13)*, Amsterdam, The Netherlands

Gartmann, A., Müller, M. and Vogt, R., 2009: Comparison of CFD Results with Experimental Data within a Street Canyon: The Influence of Averaging Time, *7th International Conference on Urban Climate*, Yokohama, Japan

Goricsán, I., Balczó, M., Rékert, T. and Suda, J.M., 2004: Comparison of Wind Tunnel Measurement and Numerical Simulation of Dispersion of Pollutants in Urban Environment. In: *Impact of Wind and Storm on City Life and Built Environment*, ed. by J.P.A.J. van Beeck, COST C14 *International Conference on Urban Wind Engineering and Buildings Aerodynamics*, D.6.1-D.6.10.

Hefny, M.M. and Ooka, R., 2008: CFD Analysis of Pollutant Dispersion around Buildings: Effect of Cell Geometry, *BBA VI. International Colloquium on Bluff Bodies Aerodynamics and Applications*, Milano, Italy

Holmes, N.S. and Morawska, L., 2006: A Review of Dispersion Modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available, *Atmospheric Environment* 40(30), 5902–5928.

Huh, C-A., Hsu, S-C. and Lin, C-Y., 2012: Fukushima-derived fission nuclides monitored around Taiwan: Free tropospheric versus boundary layer transport, *Earth and Planetary Science Letters* 319–320, 9–14.

Jasak, H., Jemcov, A. and Tukovic, Z., 2007: OpenFOAM: A C++ Library for Complex Physics Simulations, *International Workshop on Coupled Methods in Numerical Dynamics*, IUC, Dubrovnik, Croatia

Jasak, H.: 2009: OpenFOAM: Open Source CFD in Research and Industry, *International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering 1*, 89–94.

Johnson, F.T., Tinoco, E.N. and Jong Yu, N., 2003: Thirty Years of Development and Application of CFD at Boeing Commercial Airplanes, Seattle, *16th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, Orlando, Florida, USA

Kocsis, Zs., Ferenczi, Z., Havasi, Á. and Faragó, I., 2009: Operator splitting in the Lagrangian air pollution transport model FLEXPART, *Időjárás 113*, 3, 189–202.

Kristóf, G., Rácz, N. and Balogh, M., 2007: Application of ANSYS-FLUENT for meso-scale atmospheric flow simulations, *ANSYS Conference & 25th CADFEM Users' Meeting*, Dresden, Germany

Lagzi, I., Kármán, D., Turányi, T., Tomlin, A.S., Haszpra, L., 2004: Simulation of the dispersion of nuclear contamination using an adaptive Eulerian grid model, *Journal of Environmental Radioactivity 75*, 59-82.

Lajos, T., Szepesi, Zs., Goricsán, I., Régert, T., Suda, J.M., Balczó, M., 2003: Wind Tunnel Measurement and Numerical Simulation of Dispersion of Pollutants in Urban Environment, *Conference on Modelling Fluid Flow (CMFF'03)*, Budapest, Hungary

Lajos, T., 2008: Az áramlástan alapjai, Műegyetemi Kiadó, Budapest, pp. 371–396.

Laporte, L., Dupont, É., Carissimo, B., Musson-Genon, L. and Sécolier, C., 2009: Atmospheric CFD Simulations coupled to Mesoscale Analyses for Wind Resource assessment in complex terrain, *European Wind Energy Conference and Exhibition*, Marseille, France

Leelőssy, Á., 2010: Lokális szennyezőanyag-terjedés modellezése, BSc szakdolgozat, ELTE Meteorológiai Tanszék

Mészáros, R., Vincze, Cs. and Lagzi, I., 2010: Simulation of accidental release using a coupled transport (TREX) and numerical weather prediction (ALADIN) model, *Időjárás* 114, 1–2, 101–120.

Mészáros, R., Leelőssy, Á., Vincze, Cs., Szűcs, M., Kovács, T. and Lagzi, I., 2011: Estimation of the dispersion of an accidental release of radionuclides and toxic materials based on weather type classification, *Theoretical and Applied Climatology*, doi:10.1007/s00704-011-0482-0

Mikkelsen, T., Thykier-Nielsen, S., Astrup, P., Santabarbara, J. M., Sørensen, J.H., Rasmussen, A., Robertson, L., Ullerstig, A., Deme, S., Martens, R., Bartzis, J. G., Pasler-Sauer, J., 1997: MET-RODOS: A comprehensive atmospheric dispersion module, *Radiation Protection Dosimetry* 73, 45–56.

Muntean, S., Nilsson, H. and Susan-Resiga, R.F., 2009: 3D Numerical Analysis of the Unsteady Swirling Flow in a Conical Diffuser Using FLUENT and OpenFOAM, *3rd International Meeting of the Workgroup on Cavitation and Dynamic Problems in Hydraulic Machinery and Systems*, Brno, Czech Republic

Nguyen, N-T. and Wu, Z., 2005: Micromixers – a review, *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 15: R1-R16

Országos Atomenergia Hivatal (OAH), 2003: Jelentés a Paksi Atomerőműben 2003. április 10-én bekövetkezett esemény hatásági vizsgálatáról

Patankar, S.V. and Spalding, D.B., 1972: A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows, *International Journal of Heat Mass Transfer* 15, 1787–1806.

Piedelievre, J.P., Musson-Genon, L. and Bompay, F., 1990: MEDIA – An Eulerian Model of Atmospheric Dispersion: First Validation on the Chernobyl Release, *Journal of Applied Meteorology* 29, 1205–1220.

Práger, T., 1982: Numerikus prognosztika I. A hidrodinamikai előrejelzés elmélete. Egyetemi jegyzet, Tankönyvkiadó, Budapest, 327 o.

Pudykiewicz, J., 1988: Numerical simulation of the transport of radioactive cloud from the Chernobyl nuclear accident, *Tellus B 40B*, 241–259.

Sriram, G., Krishna Mohan, N. and Gopalasamy, V., 2006: Sensitivity study of Gaussian dispersion models, *Journal of Scientific and Industrial Research 65*, 321–324.

Steib, R. and Labancz, K., 2005: Regulatory modeling in Hungary – the AERMOD model. PART I. Description and application, *Időjárás 109*, 3, 157–172.

Szepesi, D. (szerk.), 1981: A levegőkörnyezet (levegőminőség és humánkomfort) tervezése, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, pp. 27–58.

Vardoulakis, S., Fisher, B.E.A., Pericleous, K., Gonzalez-Flesca, N., 2003: Modelling air quality in street canyons: a review, *Atmospheric Environment 37*, 155–182.

Yamada, T., 2000: Lagrangian Dispersion Model for Nonneutrally Buoyant Plumes, *Journal of Applied Meteorology 39*, 427-436.

Yamada, T., 2002: Modification of a Mesoscale Atmospheric Model for Simulation of Airflow around Buildings, *Air & Waste Management Association 95th Annual Conference and Exhibition*, Baltimore, USA

Függelék

1. Az OpenFOAM felhasználói beavatkozás nélküli futását lehetővé tevő vezérlő program legfontosabb utasításai

```
#!/bin/bash
cd $FOAM_RUN                                # belepés az OpenFOAM könyvtárába
FOLDER=$(date +%Y_%m_%d_%H%M)              # aktuális dátum eltárolása
mkdir $FOLDER                                # létrehozunk egy könyvtárat az adott dátum
(...)                                       # nevén
cp input.txt $FOLDER/0                      # meteorológiai adatokat tartalmazó fájl
                                           # másolása
cp koord.txt $FOLDER/constant/polyMesh/koord
                                           # geometria adatait tartalmazó fájl másolása
(...)
cd $FOAM_RUN/$FOLDER/constant/polyMesh
chmod 700 epit
./epit                                       # geometriai adatokból a számítási rács
                                           # celláinak megadása
(...)
cd $FOAM_RUN/$FOLDER
blockMesh                                   # a számítási rács celláinak és
cd $FOAM_RUN/$FOLDER/0
chmod 700 metadat
./metadat                                   # meteorológiai adatokból
                                           # kezdeti és peremfeltételek megadása
decomposePar                               # párhuzamosítás
mpirun -np 2 buoyantBoussinesqSimpleFoam -parallel # megoldás 2 processzoron
reconstructPar                             # összeillesztés
rm -r processor0
rm -r processor1
writeCellCentres                           # cellaközéppontok kiíratása
                                           # (utófeldolgozás előkészítése)
RESULTS_FOLDER=$(ls -r | awk 'NR==5 {print $1}')
                                           # eredményeket tartalmazó mappa nevét eltároljuk
                                           # változóban
cp -f $FOLDER/$RESULTS_FOLDER/cc* LATEST_RESULT
cp -f $FOLDER/$RESULTS_FOLDER/U LATEST_RESULT
                                           # eredmények mentése további feldolgozás céljára
```

2. A modell legfontosabb bemenő adatai és alapértelmezett értékeik

input.txt

```
U=          10      // Szélsébség [m/s]
dd=         270     // Szélirány [fok]
Href=       10      // Szélmérés magassága [m]
z0=         0.05    // Felszíni érdesség [m]
U*=         0.88    // U* súrlódási sebesség [m/s]
Tlevego=    15      // Levegő hőmérséklete [°C]
Tfelszin=   15      // Felszín hőmérséklete [°C]
Tepulet=    15      // Épületek hőmérséklete [°C]

Prtfloor=   0.85    // turbulens Prandtl-szám a felszínen
Prtbuilding= 0.85   // turbulens Prandtl-szám a falak mentén

kininternal= 0.01   // turbulens kinetikus energia kezdeti értéke (J/kg)
kinlet=     0.01   // turbulens kinetikus energia peremértéke (J/kg)

epsiloninternal= 0.01 // TKE-disszipáció kezdeti értéke (J/kg*s)

nu=         0.00001 // kinematikai viszkozitás [m2/s]
beta=       0.003   // térfogati hőtágulási együttható [1/K]

Sct=        0.9     // turbulens Schmidt-szám
```