

**A CMAQ – többléptékű közösségi levegőminőségi –
légköri terjedési modell felépítése**

Diplomamunka
METEOROLÓGUS MSc.
ELŐREJELZŐ SZAKIRÁNY



KÉSZÍTETTE: BÁJHÓBER ESZTER LILLA

TÉMAVEZETŐK: Dr. WEIDINGER TAMÁS

LÁZÁR DÓRA

Eötvös Loránd Tudományegyetem
Földrajz- és Földtudományi Intézet
Meteorológiai Tanszék

Budapest, 2014.

Tartalomjegyzék

Bevezetés	2
1. A légköri szennyezőanyag terjedési modellek áttekintése	3
1.1. Statisztikai modellek.....	4
1.2. Dinamikus modellek.....	5
Gauss modellek.....	5
Szabályozás orientált integrált terjedési, diszperziós modellek.....	6
Lagrange típusú modellek.....	7
Euler típusú modellek.....	7
1.3. Csatolt levegőkémiai és időjárás-előrejelző modellek.....	8
2. Csatolt levegőkémiai és időjárás-előrejelző modellek Európában	12
3. Magyarországon használt légszennyezéssel kapcsolatos modellek	14
3.1. Az Országos Meteorológiai Szolgálatnál használt légszennyezettségi modellek.....	14
3.2. Az ELTE Meteorológiai Tanszékén végzett terjedési és ülepedési modellszimulációk.....	17
4. A CMAQ és a futtatásához szükséges modulok bemutatása	18
4.1. A CMAQ modell részletesebb bemutatása.....	19
4.2. A SMOKE modell bemutatása.....	26
4.3. A modellező rendszer harmadik tagja a WRF-ARW.....	29
4.4. A WRF-CMAQ-SMOKE modellező rendszer.....	31
5. A CMAQ, a SMOKE és a WRF-ARW modell telepítése, a kapott eredmények bemutatása	35
5.1. A CMAQ modell telepítése és a tesztfuttatásának bemutatása.....	35
5.2. A SMOKE modell telepítése, a tesztfuttatásának eredményei.....	43
5.3. A WRF-ARW modell telepítése.....	50
6. Összefoglalás	52
Köszönetnyilvánítás	53
Függelék	54
Irodalomjegyzék	56
Internetes források	59

Bevezetés

Napjainkban egyre nagyobb igény mutatkozik a légköri szennyezőanyagok – az egészségre káros összetevők, mint a szálló por és az ózon – koncentrációjának mérésére és előrejelzésére. A dolgozatban bemutatott CMAQ (Community Multiscale Air Quality – többléptékű közösségi levegőminőségi) modell is ezt a célt szolgálja; használatát a US EPA (US Environmental Protection Agency – Egyesült Államok Környezetvédelmi Ügynöksége) hagyta jóvá. Céljuk levegőminőségi szimulációs modellek használata regionális, állami és lokális skálán az Egyesült Államok területén [1 – cmascenter.org/]. A szabadon letölthető modell a légköri gázok mellett az aeroszol részecskék terjedésének és ülepedésének leírására szolgál, s a WRF (Weather Research and Forecasting Model – Időjárás Kutató és Előrejelző Modell) időjárás előrejelzési modellel összekötve kétirányú csatolással is futtatható.

A dolgozatban röviden ismertetem a különböző típusú légköri szennyezőanyag (vagy más szóhasználattal nyomanyag) terjedési modelleket. Bemutatom az Európában, illetve hazánkban (az Országos Meteorológiai Szolgálatnál illetve az Eötvös Loránd Tudományegyetem Meteorológiai Tanszéken) használt modelleket. Ismertetem a CMAQ modellt és a működéséhez szükséges további két modellt (SMOKE, WRF-ARW), amelyek emissziós és meteorológiai adatokat szolgáltatnak a terjedési modell részére.

A diplomamunka készítése során megismerkedtem a CMAQ légköri terjedési modell felépítésével és adaptálásával. Részt vettem a SMOKE (Sparse Matrix Operator Kernel Emissions – Emissziós Kataszter Számító Modell) modell telepítésében. Az ELTE Atlasz szuperszámítógépére feltelepített modellek (CMAQ, SMOKE) tesztfuttatásait a VERDI (Visualization Environment for Rich Data Interpretation – Vizualizációs Felület Nagymennyiségű Adatok Megjelenítésére) megjelenítő program segítségével ábrázoltam. A dolgozat fő eredménye egy használatra kész 3D-s terjedési modell telepítése, és előkészítése hazai alkalmazásokra. A közeli jövő feladata a WRF-SMOKE-CMAQ együttes tesztfuttatása.

1. A légköri szennyezőanyag terjedési modellek áttekintése

Számos szennyezőanyag kibocsátása csökkent az elmúlt években, így Európa levegőminősége is javult, de továbbra is vannak problémák. Az emberek többsége olyan nagyvárosokban él, ahol az ózon, a nitrogén-dioxid, vagy a PM₁₀ koncentrációja meghaladja a megengedett értéket, károsítva az ott élő és a környező területeken lakó emberek egészségét. A légszennyezés problémaköre sokakat érint, a szennyezőanyagok a forrástól távoli helyekre is eljuthatnak – az országhatár sem szab gátat a terjedésnek – így hozzájárulnak az adott hely levegőminőségéhez.

A légszennyezés hatással van egészségünkre (akár 8 hónappal is csökkentheti a várható élettartamot) és környezetünkre (savasodás, eutrofizáció, magas ózonkoncentráció miatti terméskárok). Fontos tény, hogy nincs mindig lineáris összefüggés a szennyezőanyag kibocsátásának csökkenése és a levegőben lévő koncentrációja között. Természetes és antropogén forrásokból is származhat. A fosszilis tüzelőanyagok elégetése, a mezőgazdaság, a hulladékgazdálkodás mind olyan emberi tevékenységek, amelyek során nagy mennyiségű szennyezőanyag kerül a levegőbe. Természetes források közé tartoznak a vulkánkitörések, a szél fújta por, a tengeri só vagy a növények által kibocsátott illékony szerves anyagok (VOC). Európában a légszennyezés mértékét az EKÜ (European Environment Agency (EEA) – Európai Környezetvédelmi Ügynökség) felügyeli [2 – eea.europa.eu/].

A levegőszennyezés modellezése egy numerikus eszköz arra, hogy leírjuk az okozati összefüggéseket az emisszió, a meteorológia, a légköri koncentrációk, az ülepedés és más tényezők között. A levegőminőségi mérések fontos információt adnak a környezeti koncentrációról és az ülepedési folyamatokról, leírják a levegőminőséget adott helyen és időben, útmutatást adnak a levegőminőségi problémák okaihoz. A levegőminőségi modellek olyan eszközök, amelyek számszerűsítik a kapcsolatot a kibocsátás és a koncentráció között. Ismeretük és alkalmazásuk fontos a tudományban, a szabályozási feladatokban, de akár a jogi, törvényszéki alkalmazásokban is. Az újkor ipari forradalmától kezdve fontossá vált a nagy ipari kémények (pontforrás) diffúziós tulajdonságainak megértése, ekkorra már rájöttek, hogy a légszennyezés nem csupán helyi probléma.

Az első gyakorlatban is jól alkalmazható számítási módszer a lentebb részletesen bemutatásra kerülő Gauss modell volt (Gaussian Plume Model) (Daly and Zanetti, 2007). Hazánkban az 1960-as évektől kezdődően beszélhetünk légszennyeződéssel kapcsolatos kutatásokról (Szepesi, 1967). Az 1970-es évekre világossá vált, hogy a túlzott SO₂ és NO_x

kibocsátás a környezet savasodását okozhatja a forrástól távolabbi területeken is, valamint felismerték, hogy az urbanizálódott és iparosodott területeken további problémát jelent a felszín közeli ózon koncentrációjának megnövekedése (*Daly and Zanetti, 2007*). Az emberi egészség szempontjából a 10 μm -nél kisebb részecskék jelentősek (PM₁₀ méret-frakció), ugyanis ezek a részecskék könnyen jutnak le a tüdőbe (*Salma et al., 2012*). Ezeket a helyzeteket már nem tudták kielégítően jellemezni a Gauss modellekkel. Megindult az új típusú, Lagrange és Euler szemléletmódú modellezés (*Daly and Zanetti, 2007*). A pontforrásokra kidolgozott modellek után az 1980-as években megjelentek az imissziós adatokat felhasználó városi közlekedési és települési terjedési modellek (*Radnainé Gyöngyös, 2004*).

A terjedési modellek osztályozása többféleképpen történhet (*Bozó et al., 2006, Daly and Zanetti, 2007, 3 – Alkalmazott számszerű előrejelzés jegyzet*). Osztályozhatjuk őket a modellezni kívánt légköri folyamat skálája szerint, ez alapján beszélhetünk lokális, városi, nagy mezo, makroskálájú és globális éghajlati modellekről. Minden modell más tér (10 m-től az 10 000 km-ig) és idő (1 perctől a 10 évig) skálán mozog, így például a szinoptikus skálájú modellek vizsgálati területe lefedi az atlanti-európai térséget (5 000 km x 5 000 km), míg a lokális skálájú modellek gyakran nem haladják meg a 10 km x 10 km-es területet sem. Természetesen a modellezett jelenségek élettartama is változó a térszála függvényében. (Vannak olyan modellek, amelyek egyszerre többféle számítási eljárást is alkalmaznak, ezek több csoportba is besorolhatók [3 – Alkalmazott számszerű előrejelzés jegyzet]). A mezoskálától felfelé általában olyan dinamikus modelleket használnak, amelyek a légköri fizikai és kémiai folyamatok matematikai leírásával becsülik az adott anyag koncentrációjának időbeli és térbeli alakulását (*Ling, 2012*).

1.1. Statisztikai modellek

Ezek a modellek korábbi mérések statisztikai elemzésein alapulnak. Előnyük az egyszerű kezelhetőség és a kis számítógépes kapacitásigény. Nagy hátrányuk, hogy nem tudják leírni az időben változó folyamatokat, figyelmen kívül hagyják a szennyezőanyag kibocsátás mennyiségének, összetételének és területi eloszlásának változását, illetve a meteorológiai paraméterek változásából adódó hatásokat (*Ling, 2012*). Az előbb leírtak miatt nem alkalmazhatóak légszennyezettségi stratégiák kidolgozására illetve

szennyezőanyag emisszió és koncentráció közötti kapcsolatok feltárására. Pontszerű meteorológiai adatokat igényelnek [3 – Alkalmazott számszerű előrejelzés jegyzet].

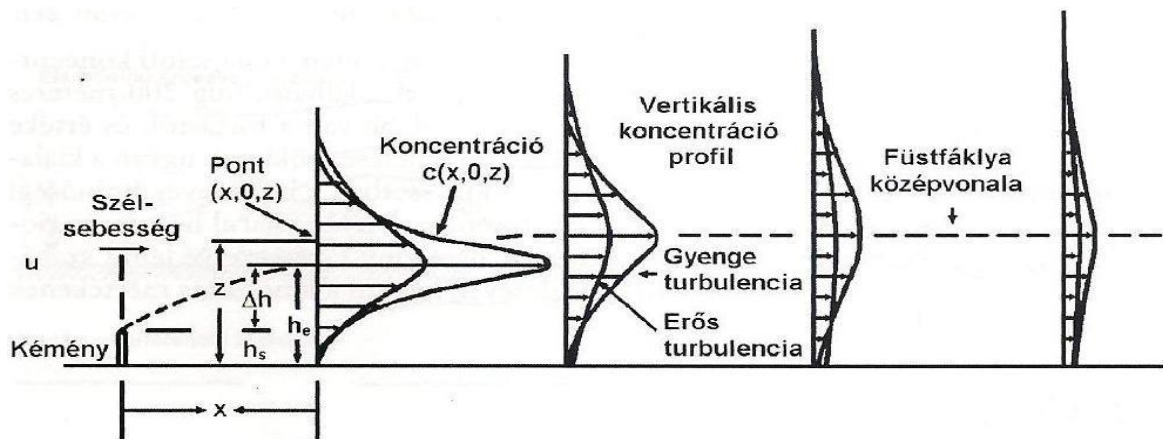
1.2. Dinamikus modellek

Gauss modellek

A Gauss 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 Gauss modellek a néhány kilométertől néhány tíz kilométerig terjedő skálájú levegőminőségi vizsgálatokban széles körben elterjedtek, használatuk az ipari létesítmények környezetvédelmi hatástanulmányainak is részévé váltak (Leelőssy, 2012). A 1. ábrán a Gauss modellel leírt szennyezőanyag terjedését láthatjuk. Az adott anyag koncentrációja (C) az x -tengely mentén ($y = z = 0$), ha egyenletes felszint, térben és időben állandó szélességet és turbulenciát tekintünk, a következő alakban írható:

$$C(x, 0, 0) = \frac{Q}{\pi\sigma_y\sigma_z u} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{h_e}{\sigma_z}\right)^2\right], \quad (1)$$

ahol Q a forráserősséget jelöli, σ_y, σ_z a levegő stabilitása által meghatározott koncentráció szóródása az y és z irányban (értéküket a légkör pillanatnyi stabilitása határozza meg), h_e pedig az effektív kéménymagasság, ahol a kéményből kiinduló füstfáklya vonala egyenessé válik, ezt a 1. ábra is jól szemlélteti (Bozó *et al.*, 2006).



1. ábra. A Gauss modell sematikus ábrája, ahol a h_e (effektív kéménymagasság) kéményből kiinduló füstfáklya középvonalának magassága, h_s a kéménymagasság (Bozó *et al.*, 2006).

Szabályozás orientált integrált terjedési, diszperziós modellek

E modellcsoport általában a Gauss modell egyenleteire támaszkodik. A modellek segítségével becsléseket készíthetünk a légszennyező anyagok koncentrációjának térbeli eloszlására. Gyakran használják együtt a GIS rendszerrel (Geographic Information System – Földrajzi Információs Rendszer), amely révén információt kaphatnak a felszínről (domborzat, borítottság, stb.). Így a topográfia, az úthálózat, és a közlekedési megfigyelések ismeretében pontosabb koncentrációkat kaphatunk a modellezett területen. Légszennyezettségi, meteorológiai és emissziós adatokat is igényelnek (Jerrett *et al.*, 2005).

AERMOD, az Egyesült Államok Környezetvédelmi Ügynöksége által javasolt egyensúlyi állapotú Gauss modell, amelyben a légtér magába foglalja a planetáris határreteg turbulencia szerkezetét (különböző magassági szinteket, beleértve a földfelszín és a kibocsátó kémény magasságát is) [4 – epa.gov/]. A meteorológiai preprocesszor a modell által használt szélmezőt a felszíni, rádiószondás, illetve a modelleredményekből állítja elő. A modell ötvözi a geográfiai adatokat (pl. a felszín alakja) a meteorológiai adatokkal, hogy meghatározza a planetáris határreteg profiljait és a turbulencia paramétereit (pl.: Monin–Obukov-hossz, keverési rétegvastagság, turbulencia intenzitása) (Daly and Zanetti, 2007). A rendszer két adatfeldolgozó egységet (processzort) tartalmaz: AERMET és AERMAP. Az előbbi a meteorológiai adatokért felelős processzor, amelynek alapja a levegő turbulens áramlása a planetáris határretegében. Az utóbbi (AERMAP)

pedig a terepi adatok feldolgozására szolgál, ami a bonyolult (komplex) terep felett építi fel a meteorológiai állapotjelzők profiljait, s szolgáltatja a 3D-s mezőket [4 – epa.gov/].

Lagrange típusú modellek

Itt egy-egy légelemet követünk (így a koordináta-rendszer a légrésekhez kötött), vizsgáljuk a tulajdonságait, feltételezve, hogy a légrések megőrzik identitását (Daly and Zanetti, 2007). Térben homogén összetételű légrések tömege nem, térfogata viszont változik, ezt a térfogatváltozást, vagyis az egységnyi levegőrész sűrűségváltozását írja le a modell (Radnainé Gyöngyös, 2004). A Lagrange típusú modellt gyakran alkalmazzák a nagy távolságra terjedő hosszú tartózkodási idejű szennyezőanyagok (pl.: SO₂) (Daly and Zanetti, 2007), regionális és szárazföldi léptékű folyamatok modellezésére (Radnainé Gyöngyös, 2004). Megjegyezzük, hogy ez a közelítés kevésbé alkalmas a térben és időben gyorsan változó koncentrációjú és rövid tartózkodási idejű gázok, mint pl. az ózon, vagy az ammónia modellezésére (Ling, 2012). Gyakori az Euler típusú modellek alkalmazása helyett, az egyszerűbb kétdimenziós, vertikálisan egyrétegű Lagrange típusú modellek használata. A légrések koncentráció változása az időben felírható a következő képlettel:

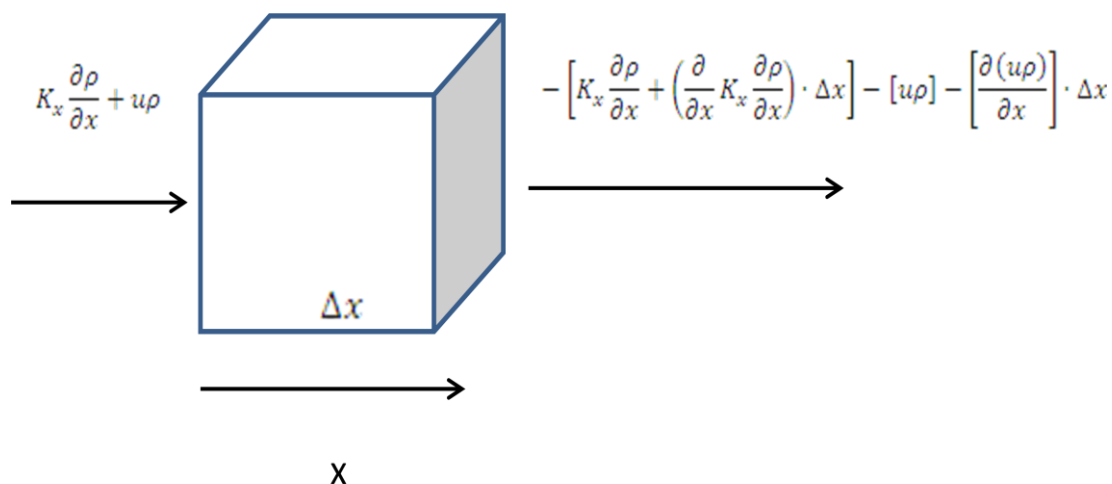
$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + u \frac{\partial q_i}{\partial x} + v \frac{\partial q_i}{\partial y} = \frac{dq_i}{dt} = F, \quad (2)$$

ahol u , v a szélvektor horizontális komponensei, q pedig az i -edik légszennyező anyag koncentrációja, míg F az integrált forrás- és nyelő erősség (Bozó *et al.*, 2006).

Euler típusú modellek

Euler típusú szemléletmódban a modellezni kívánt teret rácshálózattal borítjuk be (függőleges és vízszintes irányban is), majd a rácspontokban vizsgáljuk a levegőelem tulajdonságait (Daly and Zanetti, 2007), miközben földhöz rögzített koordináta-rendszert használunk (Radnainé Gyöngyös, 2004). A 3D-s rácshálózathoz 3D-s bemenő meteorológiai adatok szükségesek a modell számára. Az Euler típusú modellek felbontása néhány 10 km-től akár néhány méteres felbontásig terjednek [3 – Alkalmazott számszerű

előrejelzés jegyzet]. A tömeg be- és kiáramlását a 2. ábra szemlélteti az egységnyi térfogatú levegőelemben. A modellközelítés a kontinuitási egyenleten alapul, ahol ρ a légelem sűrűsége, u a szélesség, amely az x-tengellyel párhuzamos, K_x pedig a horizontális turbulens diffúziós együttható (Bozó *et al.*, 2006).



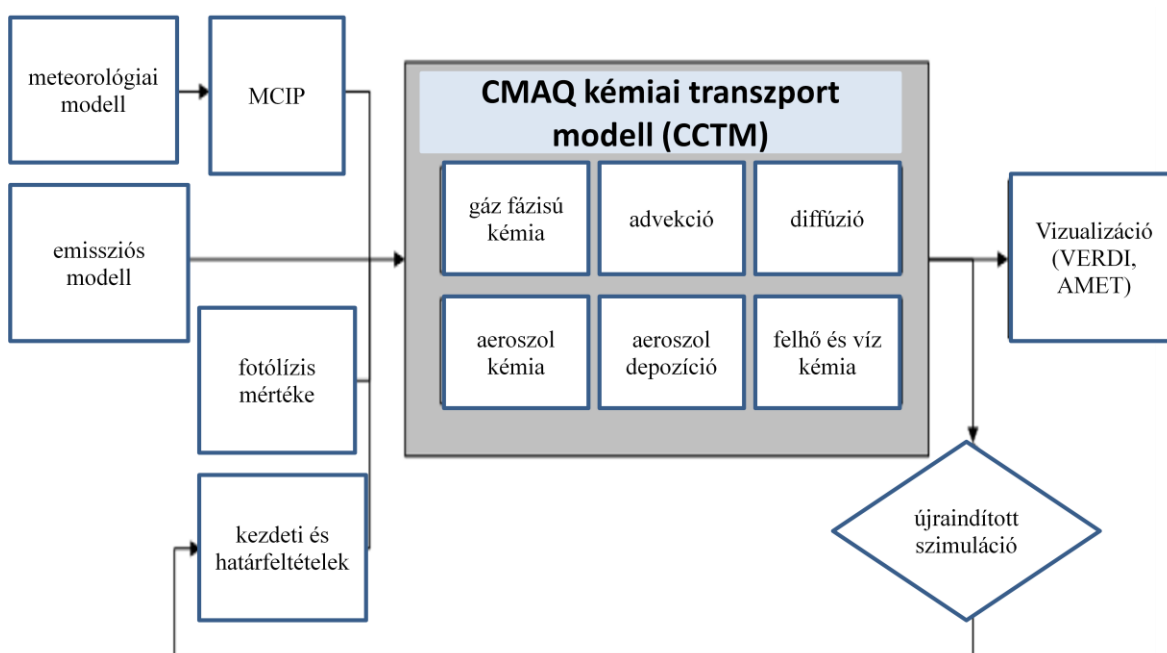
2. ábra. A tömeg be és kiáramlása egységnyi térfogatú levegőelembe (Bozó *et al.*, 2006).

1.3. Csatolt levegőkémiai és időjárás-előrejelző modellek

A fotokémiai levegőminőségi modellek (csatolt meteorológiai-levegőkémiai modellek) mára széles körben ismert és használt eszközök, amelyeket alkalmaznak a szabályozási vizsgálatoknál (elemzéseknél) pl. a kontroll stratégiák hatékonyságának megítélésénél. Ezek a skálafüggő levegőminőségi modellek képesek szimulálni a szennyezőanyag koncentráció változását a légkörben, miközben felhasználják a légkör fizikai és kémiai folyamatait jellemző matematikai egyenleteket. Alkalmazhatóak lokális, regionális, nemzeti és globális skálán is (Daly and Zanetti, 2007). Az időjárás-előrejelző modellek és a légköri kémiai transzport modellek (CTM – Chemical Transport Model) összekapcsolásával úgynevezett kémiai időjárás előrejelző modelleket (Chemical Weather Forecasting Models) kapunk (Baklanov *et al.*, 2010). Ezek a modellek Euler féle szemléletmódúak. A 3. ábra mutatja a fotokémiai modellek sematikus felépítését, a CMAQ kémiai transzport modell felépítésén keresztül [1 – cmascenter.org/].

Az Euler típusú levegőminőségi modellezés kezdetei az 1970-es évekre nyúlnak vissza, amikor a városi légszennyezettség modellezésére fotokémiai doboz modellt (photochemical box model) használták, majd ezeket követték a diszperziós modellek. Az

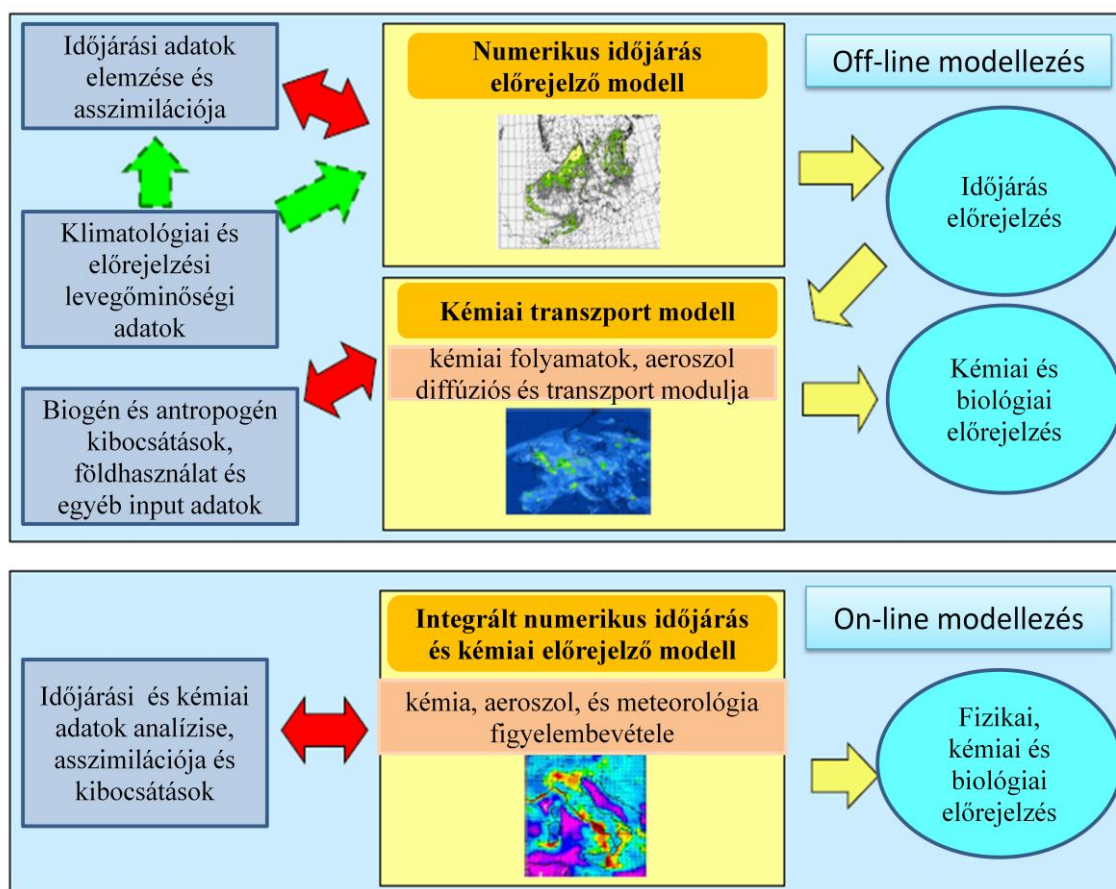
első két korai városi skálájú fotokémiai modell volt az UAM (Urban Airshed Model) és a CIT (Caltech Air Quality Model). Ezt követően fejlődésnek indultak az ilyen típusú városi és regionális skálájú modellek is. A RADM (Regional Acid Deposition Model) az elsők között volt, amely kapcsolatot teremtett a meteorológia és a levegőminőségi modellek között. A meteorológiai adatokat a hidrosztatikus MM4 (Mesoscale Model Version 4) biztosította, majd később a nem hidrosztatikus MM5 (Fifth Generation Penn State University/National Center for Atmospheric Research (NCAR) Mesoscale Model System – Pennsylvaniai Állami Egyetem és a Nemzeti Légkör Kutató Központ Mezoskálájú Modellező Rendszere) szolgáltatta (Byon and Schere, 2006).



3. ábra. A CTM sematikus felépítése és a hozzájuk kapcsolódó input adatokat szolgáltató modellek a CMAQ kémiai transzportmodell (CCTM) sematikus felépítése alapján, ahol MCIP – The Meteorology-Chemistry Interface Processor – a modell meteorológiai-kémiai határfelület progamegysége [1 – cmascenter.org/].

A szakirodalomban számos más elnevezést is használnak a kémiai időjárás és levegőminőségi előrejelző modellekre, mint például regionális, kontinentális, vagy globális levegőminőségi modellek, diszperziós modellek, légkörkémiai modellek, kémiai transzport modellek (ezeket főleg légköri kémiai szimulációkra használják), valamint néha használják a biológiai időjárás előrejelzést is, amin a biológiai eredetű alkotórészek légköri előrejelzését (különböző pollenek, lebegő részecskék) értik (Kukkonen et al., 2012).

A levegőminőségi modellek fő célja kapcsolatot létesíteni a meteorológia és a kémiai átalakulások, a légköri nyomanyagok emissziója és az átalakulási folyamatok között. [1 – cmascenter.org/]. Ezáltal beszélhetünk kapcsolt modellekről, amelyeknek két típusa van: (1) off-line – külön-külön futtatott, visszacsatolás nélküli – és az (2) on-line – egyszerre futtatott, visszacsatolásokkal rendelkező – integrált modell. A modellek mindkét típusát használják, de más-más célokra, eltérő alkalmazásokra (Kukkonen et al., 2012). Egyirányú csatolásról beszélünk, ha a numerikus időjárás előrejelző modell által készített mezőket használja fel a levegőkémiai és transzport modell, vagy a levegőkémiai és transzport modell által készített adatokat használja fel a másik modell a futása során. A numerikus időjárás előrejelző modell által biztosított analízis, vagy előrejelzett adatok „hajtják meg” a légköri kémiai transzport modellt, amelyeket korlátozott időközönként (akár 1, 3, 6 óránként) olvas be a transzportmodell (ezzel szemben az on-line kapcsolt modellek esetében minden egyes időlépcsőre rendelkezésre állnak a meteorológiai adatok) (Baklanov, 2010).



4. ábra. Az off-line és on-line modellező rendszerek felépítése (Kukkonen et al., 2012).

Az on-line modellező rendszer – ahol a meteorológiai és kémiai folyamatok közötti kölcsönhatások is megjelennek – egyszerre jelzi előre a meteorológiai diszperziós és légszennyezettségi mezőket [3 – Alkalmazott számszerű előrejelzés jegyzet]. A légköri kémiai transzport modellbe épített numerikus előrejelző modell biztosítja a visszacsatolási folyamatokat minden időlépcsőnél (*Baklanov, 2010*). Az eredményeket felhasználva sokrétű előrejelzést kaphatunk (biológiai, kémiai, fizikai vonatkozású előrejelzések). A 4. ábra szemlélteti az on-line és az off-line kémiai transzport modellező rendszer sémáját. Az on-line modellek előnyei közé tartozik, hogy lehetőség van aeroszol részecskék és a légkör közötti visszacsatolási mechanizmusok figyelembevételére, elérhető az összes 2D-s és 3D-s meteorológiai változó minden időlépcsőben, lehetőség van a visszacsatolások figyelembevételére a meteorológia-emisszió és a meteorológia-kémiai összetétel között, nincs szükség meteorológiai pre- és posztprocesszorra [3 – Alkalmazott számszerű előrejelzés jegyzet].

Tehát léteznek off-line és on-line kapcsolt kémiai időjárás előrejelző modellek, ahol az utóbbi esetében már megjelennek a meteorológiai és kémiai mechanizmusok közötti kapcsolatok, a különböző visszacsatolások révén. A légköri folyamatok esetében nagyon fontosak a különböző visszacsatolási mechanizmusok (ezeket az off-line módban kapcsolt modellek nem adják vissza), ugyanis több tanulmányban is kimutatták, hogy a légköri folyamatok (a csapadék, a planetáris határréteg folyamatai, a felhőképződési folyamatok, stb.) függenek a légkörben található kémiai komponensek koncentrációjától. A kémiai anyagok – mint például az üvegházhatású gázok – befolyásolják az időjárási és a légköri folyamatokat. Egyes aeroszol részecskék (pl.: karbon, vas, alumínium) melegíthetik a légkört – mivel abszorbeálják a napsugárzást – más részecskék (pl.: víz, szulfátok, nitrátok) viszont hűthetik – a rövidhullámú sugárzás visszaverése révén. Különböző érzékenységi vizsgálatok kimutatták, hogy az on-line kapcsolt rendszerek pontosabb eredményeket adnak a modellezés során, mint az off-line kapcsolt rendszerek. A csatolt modellek célja, hogy egyszerre tartalmazzák a környezetszennyezési, regionális és városi, klimatológiai és meteorológiai állapotokat, valamint a népesség számának adatait (*Baklanov, 2010*).

A dolgozatban később tárgyalt CMAQ modell is a csatolt kémiai transzport modellekhez tartozik. A modellt kutatási célokra is használják, segítségével próbálják jobban megérteni és szimulálni a kémiai és fizikai kölcsönhatásokat a levegőben, valamint megbecsülni a levegőminőségi alkalmazások hatását összetett szennyezőanyagok esetén, többféle skálán (*Daly and Zanetti, 2007, 1 – cmascenter.org/*). Az UAM (Urban Airshed

Model – Városi Légekri Modell) modell is ide sorolható, amelyet a SAI (System Applications International – Nemzetközi Rendszer Alkalmazások) fejlesztett ki. A legszélesebb körben használt fotokémiai levegőminőségi modell a világon. A modellt folyamatosan fejlesztik és bővítik, amelynek köszönhetően egyre megbízhatóbbá válik (Daly and Zanetti, 2007).

2. Csatolt levegőkémiai és időjárás-előrejelző modellek Európában

Az időjárás-előrejelző modellek és a légekri kémiai transzport modellek (CTM – Chemical Transport Model) összekapcsolásával úgynevezett kémiai időjárás előrejelző modelleket kapunk. A légekri kémiai összetételének rövid idejű változékonysága (kevesebb, mint 2 hét) szabja meg a kémiai időjárást (Baklanov, 2010). A kémiai transzport modellek adják a modellező rendszer számára szükséges kémiai anyagok tér- és időbeli eloszlását. A modellező rendszernek néhány kulcsfontosságú folyamatot tartalmaznia kell (advekción, turbulens diffúzió, kémiai átalakulások, aeroszollal és a mikrofizikával kapcsolatos folyamatok, természetes és antropogén kibocsátások időbeli és térbeli eloszlása) a szennyezőanyagok légekri koncentrációjának számításához (Kukkonen et al., 2012). A következőkben bemutatok néhány Európában használt kémiai időjárás előrejelző modellt.

A Novosibirski Tudományos Iskola (Novosibirsk Scientific School) az elsők között fejlesztette ki on-line kapcsolt modellező rendszert a mesterséges hatások légekri folyamatainak modellezésére. Az ilyen típusú modelleket jelenleg is amerikai, kanadai és japán intézetek fejlesztik és használják operatíván a levegő minőségének előrejelzésére és kutatására (Baklanov et al., 2010).

Az enviro-HIRLAM (Environment-High Resolution Limited Model – Környezeti Nagy Felbontású Korlátos Modell) rendszert a Dán Meteorológiai Intézet (Danish Meteorological Institute – DMI) fejlesztette közösen más intézetekkel (University of Copenhagen, Tartu University (Estonia), Russian State Hydro-Meteorological University, Bilbao University (Spain), Odessa State Environmental University (Ukraine), etc.)

(Baklanov, 2010). Ez egy mezoskálájú on-line integrált rendszer, amely figyelembe veszi az aeroszol részecskék közvetett hatásait is (Baklanov et al., 2010). A modellt meteorológiai és kémiai időjárás előrejelzésére és kutatására használják (on-line kapcsolt, azaz kétirányú visszacsatolásokat tartalmaz a szennyezőanyagok és a meteorológiai folyamatok között) (Baklanov, 2010). A 3D-s Euler típusú rendszert a HIRLAM numerikus időjárás előrejelző modell és az Enviro kémiai transzport modell alkotja. A modell számításba veszi a természetes eredetű kibocsátások közül a vegetációs (izoprém, monoterpén, α -pinén, β -pinén, ...), az állati (ammónia) és óceáni (dimetil-szulfid, ammónia, CO) eredetű emissziót is. A modellező rendszer segítségével készítenek pollen előrejelzéseket is 5 km-es horizontális ráctávolsággal. A hibrid felszínkövető szigma és nyomási koordináta-rendszerben 40 vertikális szintet különítenek el 30 m-től (felszíntől számítva) 500 m-es magasságig (Kukkonen et al., 2012).

Az ausztriai 3D-s Euler típusú kémiai időjárás előrejelző rendszer (AQA – Air-Quality model for Austria – Levegőminőségi Modell) az ausztriai ALADIN meteorológiai és CMAx (Comprehensive Air-Quality Model with extension – Átfogó Levegőminőségi Modell bővítésekkel) kémiai transzport modellből épül fel, amelyet a ZAMG-nál (Zentralanstalt für Meteorologie und Geodynamik – Meteorológiai és Geodinamikai Központi Intézet) használnak. A két modellt off-line módon kapcsolták össze, amelynek a SMOKE emissziós modell biztosítja az input emissziós adatokat. A rendszer számításokat végez talaj eredetű (pl.: biogén NO és NO₂) és vegetáció általi (terpének, izoprének, reaktív VOC-ok és egyéb anyagok) természetes eredetű kibocsátására is. A horizontális ráctávolság Közép-Európára 28,9 km, ezen belüli az Ausztriára és az azt körülvevő területekre 9,63 km. A vertikálisan 15 szintet tartalmazó modellező rendszer 30 m-től 2,5 km-ig végez terjedési számításokat. Céljuk, hogy a városi kibocsátásoknak megfelelően különböző kémiai transzport diszperziós modellek segítségével jó minőségű levegőminőségi előrejelzéseket adjanak az NO₂, PM₁₀ és O₃ koncentrációjára (Kukkonen et al., 2012).

A Madridi Műszaki Egyetem (UPM – Technical University of Madrid) különböző alternatívákat tanulmányoz a spanyolországi levegőszennyezés csökkentésének érdekében. Több lehetséges levegőszennyezettségi forgatókönyvük van a kibocsátási előrejelzések alapján 2020-ig. Céljuk a forgatókönyvek lehetséges hatásainak vizsgálata levegőminőségi modell segítségével. Erre a célra használják az off-line kapcsolt, 3D-s Euler szemléletmódú CMAQ modellező rendszert, amelynek a SMOKE modell biztosítja az előre elkészített emissziós adatokat (inputokat) (Borge et al., 2003). A CMAQ tartalmaz

kémiai, transzport és dinamikai sémákat is, ahol a dinamikai és kémiai kölcsönhatások a légköri szennyezőanyagok között többféle skálán történnek. A modellt úgy tervezték, hogy vizsgálható legyen vele a különböző szennyezőanyagok (beleértve a troposzférikus ózont és egyéb oxidánsokat is), aeroszol részecskék (PM₁₀) és a savas ülepedésű anyagok terjedése (órás felbontástól évesig). A CMAQ modellnek többféle meteorológiai modell (MM5, WRF) is biztosíthatja a szükséges bemenő adatokat. Spanyolországban például az MM5 numerikus előrejelző modell biztosítja a megfelelő bemenő input meteorológiai adatokat. Az adatok Európára 50 km-es horizontális felbontásban állnak rendelkezésre, míg az Ibériai-félszigetre 27 km-es a horizontális ráctávolság. A rendszer 15 vertikális szintet tartalmaz a felszíntől egészen 100 hPa-ig. A modell segítségével készítenek elemzéseket az ipari üzemek koncentráció kibocsátásairól, szemétegetők környezeti hatásairól valamint a higany szállításának és átalakulásának modellezéséről is (Kukkonen *et al.*, 2012). Az MM5 – SMOKE – CMAQ modellező rendszert Spanyolországon kívül még pl. az USA-ban, Arizona államban az O₃ koncentráció eloszlásának előrejelzésére is használják, főleg Phoenix térségében (Lee *et al.*, 2007). Az USA-ban, több más államban használják a CMAQ kémiai transzport modellt levegőminőségi előrejelzésekre. A Második Texasi Levegőminőségi Tanulmányban (TexAQSI 2006 – The second Texas Air Quality Study) pl. Kelet-Texasra készítettek számításokat az ózonnál és az aeroszollal 2006 nyarára. A tanulmány célja a források és légköri folyamatok megértése a fotokémiai szennyezőanyagok és a regionális köd esetében Texas területére a nyári időszakban (Wilczak *et al.*, 2009).

3. Magyarországon használt légszennyezéssel kapcsolatos modellek

3.1. Az Országos Meteorológiai Szolgálatnál használt légszennyezettségi modellek

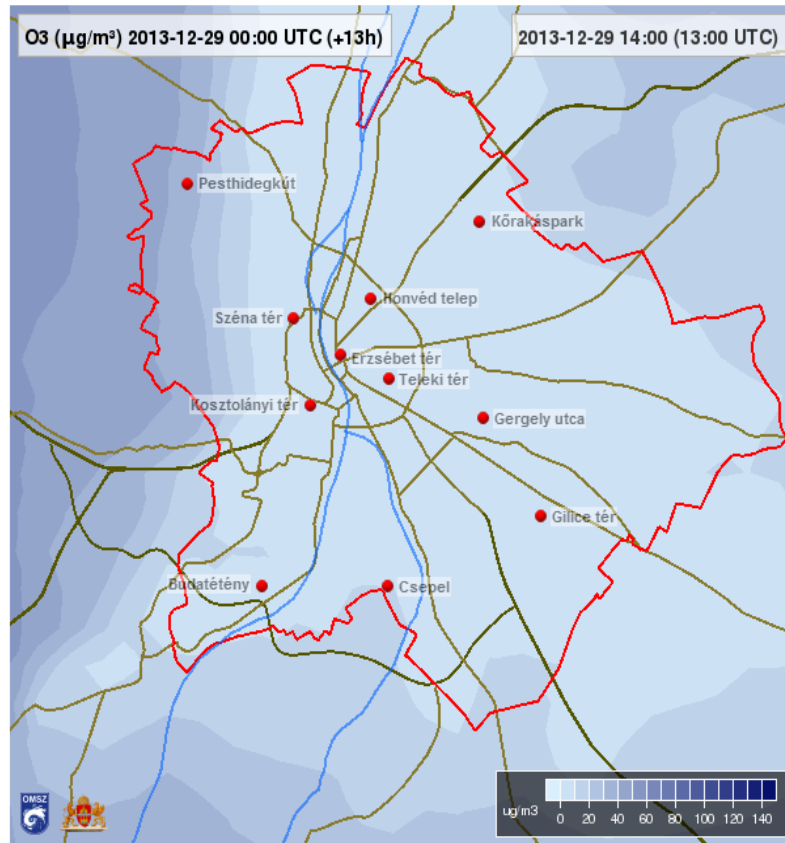
Az Országos Meteorológiai Szolgálat (OMSz) honlapján [6 – met.hu, 7 – met.hu] olvashatunk a szolgálat által használt szennyezőanyagok terjedését és átalakulásait leíró matematikai modellekről. A légszennyező anyagok hosszú- és középtávú terjedésének

modellezését az 1990-es évektől a FLEXPART modellel végzik. A modell figyelembe veszi az advekciót, a diffúziót, a száraz és nedves ülepedést, a radioaktív bomlást, de a kémiai átalakulásokat nem tartalmazza. A modell futtatható backward (ismerem a koncentrációt és abból számolok vissza a forrás helyére) és forward módban is (a szennyezőanyag szállítás útját kapjuk meg). Az OMSz-ban a modellt operatív célokra használják és forward módban futtatják. A modellt használhatjuk ipari (pl. nukleáris) balesetek, vagy vulkánkitörések esetén a levegőbe kerülő szennyezőanyagok terjedésének és eloszlásának az előrejelzésére is.

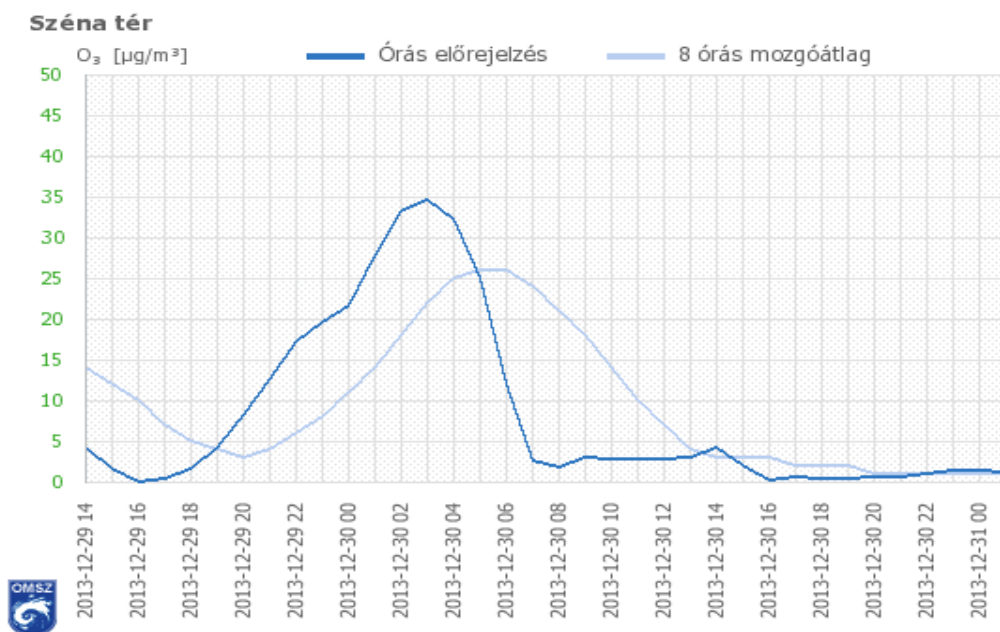
Lokális skálájú szennyezőanyag terjedés, és az ipari forrásokból történő szennyezőanyag kibocsátás hosszú távú hatásainak vizsgálatára elterjedten alkalmazzák az AERMOD modellt is. Nagy előnye, hogy a domborzat áramlásmódosító szerepét is figyelembe veszi.

Az Országos Meteorológiai Szolgálat készíti Budapest egész területére 1 órás felbontással a levegőben előforduló nitrogén-dioxid, kén-dioxid, ózon és szálló por (PM₁₀) koncentrációjának 2 napos előrejelzését (5. ábra és 6. ábra). A szolgálat által használt modellező rendszer alapja a CHIMERE levegőkémiai transzport modell, amelynek futtatásához szükséges input meteorológiai adatokat a WRF (finom felbontású numerikus előrejelző modell) adja. A szükséges input emissziós rácsponti adatbázist a pontforrások (üzemek és erőművek kibocsátása), a becsült lakossági kibocsátás és a főváros területén végzett forgalomszámlálási adatok felhasználásával készítették el. A modell körülbelül 80 kémiai anyagra felírt több mint 300 kémiai reakció segítségével veszi figyelembe a légköri kémiai átalakulásokat. A szennyezőanyagok koncentrációinak várható alakulását óráról órára változóan térképen ábrázolják, az egészségügyi határérték túllépéseket pedig grafikon segítségével szemléltetik [6 – met.hu/].

A szolgálat 1997–1998-ban installálta hazai környezetbe a MEDIA diszperziós modellt. Az Euler típusú modell figyelembe veszi a radioaktív bomlási folyamatokat, valamint a száraz és nedves ülepedés hatását is. A modellt a METEO FRANCE-ban fejlesztették ki a légköri szennyezőanyagok 3D-s modellezésére. A MEDIA modellel az OMSz-ban használt ALADIN/LACE, vagy az ECMWF modell felhasználásával Közép-Európa területére és az atlanti-európai térségre is kiszámíthatók a szennyezőanyag légköri koncentrációmezői, valamint a száraz és nedves ülepedés mértéke (Ihász, 2000).



5. ábra. Példa az Országos Meteorológiai Szolgálat ózonkoncentráció ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) előrejelzésének Budapest térségére vonatkozó térképes megjelenítésére [8 – met.hu/].



6. ábra. Példa az Országos Meteorológiai Szolgálat ózonkoncentráció ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) előrejelzésére Budapest, Széna térre [9 – met.hu/].

3.2. Az ELTE Meteorológiai Tanszékén végzett terjedési és ülepedési modellszimulációk

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem Meteorológiai Tanszékén is foglalkoznak léggöri szennyezőanyagok terjedésének modellezésével. A TREX (TRansport-Exchange – Terjedési-Kicszerélődési) modellsomag segítségével különböző szennyezőanyagok léggöri terjedését és az általuk okozott környezeti terhelés szimulálását végzik Lagrange (trajektóriák mentén) és Euler típusú (adott rácshálózaton) szemléletben. A modellel nemcsak szimulációkat végeznek lokális, regionális és kontinentális skálán, de folyamatosan fejlesztik is azt. Emellett még a Gauss és a CFD (Computational Fluid Dynamics) modellek adaptálását, fejlesztését és alkalmazását is végzik.

A szennyezőanyag terjedésének szimulálására leginkább alkalmas modell kiválasztása függ a kitűzött céltól. A tanszéken nukleáris baleseti szimulációk végrehajtásához fejlesztették ki a háromdimenziós Euler típusú terjedési modellt a Paksi Atomerőmű térségére, amely alkalmas különböző szennyezőanyagok terjedésének és kémiai reakcióinak leírására, egy esetleges atomerőműben bekövetkező baleset szimulálására. A modell léggöri transzportegyenletei figyelembe veszik az advekción, a függőleges és vízszintes diffúziót, az ülepedést, a kémiai reakciókat és az emisszió hatását is (Mészáros *et al.*, 2012). Az Euler típusú TREX modell és az Országos Meteorológiai Szolgálat által fejlesztett ALADIN numerikus időjárás előrejelző modell összekapcsolásával szimulálják a nukleáris és toxikus szennyezőanyagok szállítási, átalakulási és depoziációs folyamatait (Mészáros *et al.*, 2010). Szintén az erőmű térségére készítették el a háromdimenziós Lagrange típusú terjedési modellt, amely képes pontosan és gyorsan előrejelezni a szennyezőanyag terjedésének leírása mellett a légszennyezési és a dózis szinteket is.

A terjedési modellszimulációk mellett foglalkoznak még a tanszéken a légszennyező anyagok ülepedési sebességének becslésével is. A TREX terjedési-kicszerélődési modell lehetőséget ad az emissziós mezők számítására az emissziós adatok, a részletes kémiai reakciómechanizmusok és a terjedési folyamatok ismeretében. Az ülepedési sebesség értékét a felszín-léggör kölcsönhatások részletes parametrizációja alapján adják meg (Mészáros *et al.*, 2012).

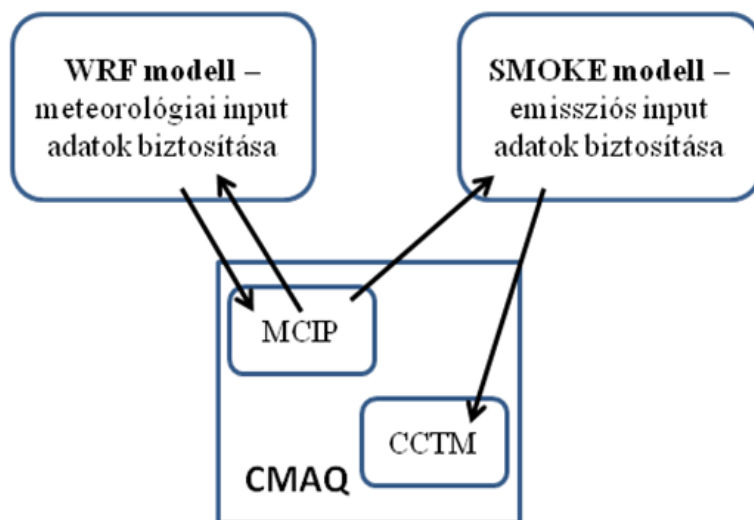
A nyári félévben kialakulhatnak nagy ózonkoncentrációval jellemzett időjárási helyzetek Közép-Európában, így Magyarországon is. Nagyon fontos, hogy az ózonkoncentráció ne haladja meg a jogszabályokban előírt értéket, mivel az ózon és egyéb

fotooxidánsok károsítják az emberi egészséget, kárt okozhatnak a természetes növényzetben és a mezőgazdasági termelésben. Ezért fontos olyan eszközök kidolgozása, amelyek segítenek megbecsülni e légszennyező anyagok rövid – és hosszú távú hatásait. E célból az ELTE, az OMSz és a Leedsi Egyetem közösen dolgozott ki egy Euler típusú fotokémiai légszennyezettségi modellt (*Lagzi et al., 2009*).

4. A CMAQ és a futtatásához szükséges modulok bemutatása

A diplomamunka fő célja a CMAQ (5.0.1-es verzió) modellező rendszerének megértése és telepítése, majd futtatása az ELTE Atlasz szervergépen létrehozott saját főkönyvtárunkban. Ahhoz, hogy a modellező rendszer a későbbiek folyamán sikeresen futtatható legyen Magyarország területére, szükség volt a bemenő adatokat biztosító további két modell (WRF, SMOKE) telepítésére is, amelyben szintén részt vettem. Az US EPA honlapján [10– cmascener.org/] található felhasználói útmutató alapján elsőként a CMAQ modellnek bemeneti emissziós adatokat adó SMOKE modellt (3.1-es verzió) telepítettük, majd a modellcsomaghoz kapott adatokkal teszteltük annak sikeres futtatását. Ez után a későbbi operatív futtatások érdekében úgy döntöttünk, hogy a korábban már Gyöngyösi András Zénó által a szervergépre feltelepített CMAQ modellt is feltelepítjük [1 – cmascener.org/] a saját főkönyvtárunkba a megfelelő beállításokkal. A modellt a fent megnevezett honlapról töltöttük le. Ugyan úgy, mint a SMOKE modell esetében, itt is járt a modellcsomaghoz a sikeres telepítés teszteléséhez szükséges adatállomány. Ennek segítségével győződünk meg a telepítés sikeréről. Ezt követte az input meteorológiai adatokat szolgáltató WRF-ARW modell (3.5.1-es verzió) telepítése. Az általunk felépített WRF-CMAQ-SMOKE modellező rendszer sematikus felépítését a 7. ábra szemlélteti. A diplomamunka keretein belül megtörtént a három modell-elem telepítése és tesztfuttatása. A három modell összekapcsolása és Magyarországra történő futtatása a közeli jövő feladata. A WRF és a CMAQ modell összekapcsolása kétirányúan történik majd, ami annyit jelent, hogy a WRF biztosítja a CMAQ MCIP progamegysége számára a meteorológiai inputokat, ugyanakkor az MCIP progamegység adja a kémiai információkat a WRF modell számára (erről a 4.4. fejezetben írok). A következőkben

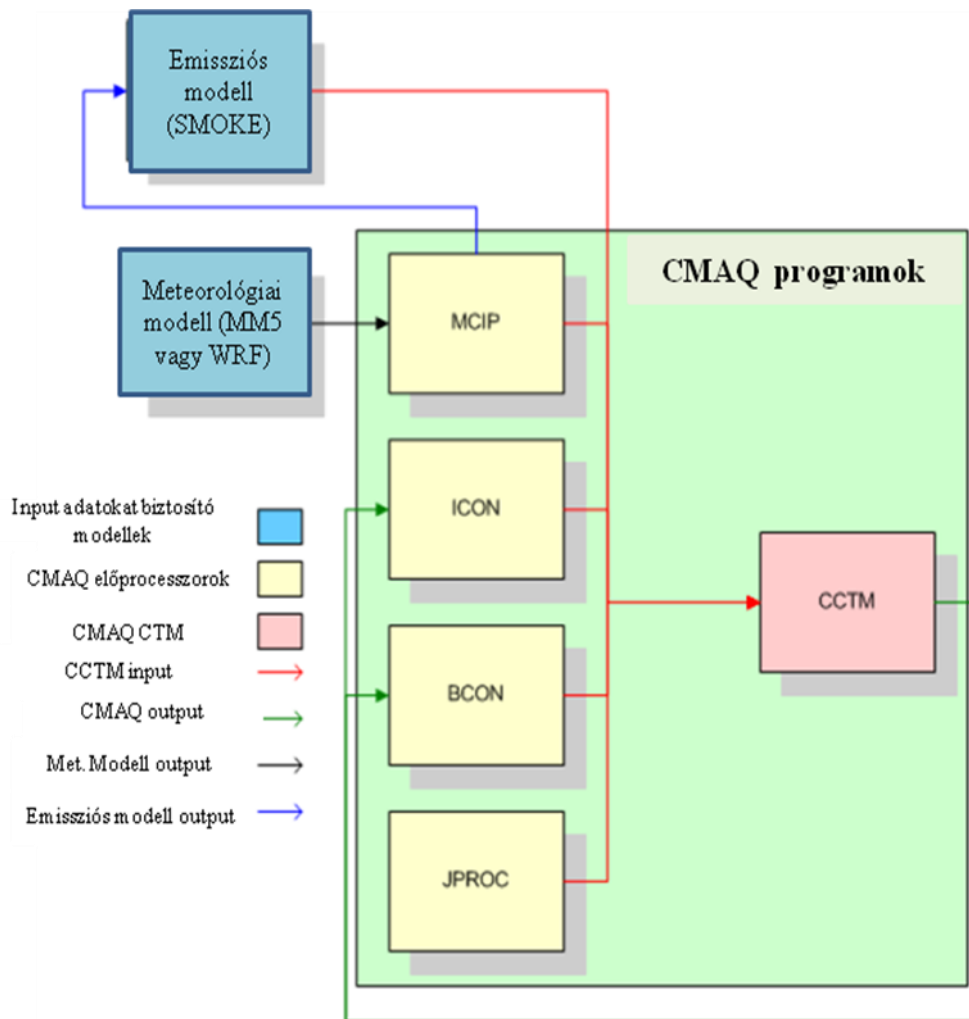
részletesebben ismertetem a CMAQ-et és a futtatásához szükséges további két modellt (SMOKE, WRF), majd az 5. fejezetben részletesen bemutatom az itt leírt munka folyamatát, illetve a tesztfuttatásból származó eredményeket a VERDI megjelenítő program segítségével, amelyet letölthetünk a honlapról [13 – cmascenter.org/].



7. ábra. A CMAQ modell progamegységei (MCIP – meteorológiai-kémiai határfelület progamegység, CCTM – CMAQ kémiai transzport modell) és a telepített modellek közötti kapcsolat, ahol a WRF és a CMAQ MCIP progamegysége közötti kettős nyílazás a kétirányú csatolást jelenti.

4.1. A CMAQ modell részletesebb bemutatása

A CMAQ egy harmadik generációs, dinamikusan fejlődő, sokoldalú, szabadon hozzáférhető és fejleszthető modell. Szimulációkat készíthetünk vele az egész troposzférára a szálló porról (PM), az ózonnól, a levegőben lévő mérgező szennyezőanyagokról, a látótávolságról, a savas kimosódásról. Könnyen alkalmazható mind kutatási, mind szabályozási és előrejelzési célokra is. A 3D-s Euler típusú modell az egyes cellákban kiszámolja az anyagmérleget, majd ezt az információt „továbbadja” a szomszédos ráscelláknak. Képes különféle levegőminőségi szempontokat egyidejűleg kiszolgálni különböző térbeli skálákon (a kisebb területek modellezésétől akár az egész hemiszféra modellezésére is kiterjedhet).



8. ábra. A CMAQ modell rendszerének felépítése, a működéséhez szükséges modellek és programegységek feltüntetésével. A nyilak az adatforgalom irányát jelentik meg. (MCIP – The Meteorology-Chemistry Interface Processor – meteorológiai-kémiai határfelület programegység, ICON – The Initial Conditions Processor – kezdeti feltételek meghatározása, BCON – The Boundary Conditions Processor – peremfeltételek meghatározása, JPROC – The clear-sky photolysis rate calculator – tiszta égboltú fotolízis mértékének meghatározása.) [1 – cmascenter.org/]

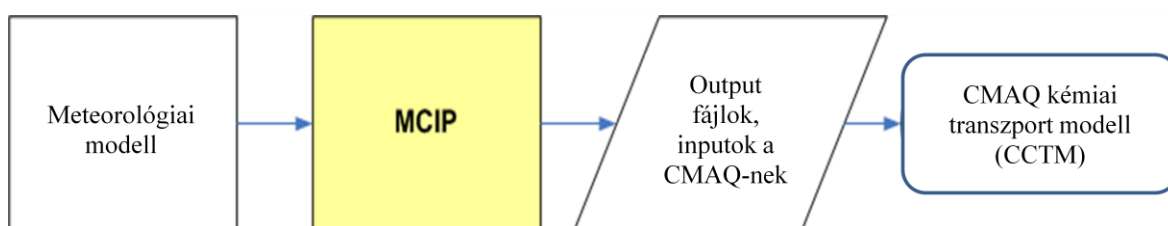
A CMAQ modellnek két fő bemeneti adatforrása van: (1) a meteorológiai adatok és (2) az emissziós források, amelyek hatással vannak a levegő minőségére. Az időjárási körülmények az „elsődleges fizikai hajtóerők” a légkörben (pl.: hőmérsékletváltozás, szél, felhő- és csapadékképződés), így ezek az adatok adják az alapját a 3D-s légköri terjedési modellszámításoknak. Az MM5 és a WRF modell is kompatibilisek a CMAQ modellel. Az emissziós bemeneti adatokat a CMAQ más emissziós modellek eredményeiből kapja, amelyek megadják a kibocsátott vegyületek mennyiségét, a szennyező forrás helyét és

időbeli változékonyságát. A nyílt forráskódú SMOKE modell, vagy a CONCEPT (Consolidated Community Emissions Processing Tool) modell is biztosít elérhető éves és országos szintű bemeneti emissziós adatokat a CMAQ modell számára. Ezek a bemeneti adatok olyan horizontális és vertikális felbontásúak, olyan időszakokra vonatkoznak, és olyan területet fednek le, amit a légköri terjedési modell igényel. A bemeneti emissziós adatoknak tartalmazniuk kell többek között a VOC-okat (Volatile Organic Compound – illékony szerves vegyületek), amelyek a CMAQ kémiai parametrizációját segítik. A bemeneti adatforrások az aeroszol mennyiségéről is adnak információt.

A modell rendszerét 5 fő program egység (processzor) alkotja, amelyek a következők:

- (1) kezdeti feltételek meghatározása (*ICON* – The Initial Conditions Processor),
- (2) peremfeltételek meghatározása (*BCON* – The Boundary Conditions Processor),
- (3) tiszta égboltú fotolízis mértékének meghatározása (*JPROC* – The clear-sky photolysis rate calculator),
- (4) meteorológiai – kémiai határfelület programegység (*MCIP* – The Meteorology-Chemistry Interface Processor),
- (5) CMAQ kémiai transzport modell (*CCTM* – The CMAQ Chemistry-Transport Model).

A 8. ábra jól szemlélteti a több modellből (SMOKE, WRF, CMAQ – CCTM) felépülő rendszert. Az MCIP egység dolgozza fel a meteorológiai modelltől kapott adatokat, így az általa adott eredmények bemenő adatként szolgálnak majd az emissziós modell számára, amely input emissziós adatokat biztosít a CMAQ CCTM programegységének. Az adatáramlást a 9. ábrán figyelhetjük meg.



9. ábra. Az MCIP programegység folyamatábrája [1 – cmascener.org/].

A levegőminőségi szimulációk végrehajtásához elengedhetetlen a kezdeti és peremfeltételek megadása, amelyet az ICON és BCON egység végez. A kezdeti feltételek

(ICON végzi ezeket a számításokat) biztosítják, hogy már az első időlépcsőben ismerjük az individuális kémiai anyagok koncentrációját a modellezett terület minden részén, míg a határfeltételek (BCON adja) az oldalsó határokon adják meg az adott anyag koncentrációját. Ezeknek az egységeknek a futása során kapjuk meg azokat a koncentrációkat, amelyek a CMAQ modell számára szükségesek. A JPROC egység számítja ki a fotolízis (molekulák fény hatására történő bomlása) mértékét tiszta égbolt esetén. A CCTM programegysége fut le utoljára, amely előállítja többek között a szennyezőanyag koncentrációjának becsült értékét, a nedves és a száraz ülepedés mértékét, a láthatósági viszonyokat (légtörési homályosság, látótávolság) [1 – cmascenter.org/].

A hőmérséklet, nyomás és a nedvességi változók fejezik ki a rendszer termodinamikáját a legtöbb numerikus időjárás előrejelző modellben. A többléptékű levegőminőségi alkalmazásoknál a prognosztikai egyenleteket konzervatív formában adják meg hasonlóan a kontinuitási egyenlethez (Byun and Schere, 2006). Az i -edik anyag tömegmegmaradási egyenlete egységnyi felületre és egységnyi térfogatra a derékszögű koordináta-rendszerben felírható a következő alakban:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \underbrace{-\varphi_i \operatorname{div}(\vec{v}) - \vec{v} \nabla \varphi_i}_{b.} + \underbrace{D \nabla^2(\varphi_i)}_{c.} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial \varphi_i}{\partial z} \right)}_{d.} + \underbrace{Q_{\varphi_i}}_e + \underbrace{R_{\varphi_i}}_f + \underbrace{W_{\varphi_i}}_g, \quad (3)$$

ahol φ_i adott anyag mennyisége, D molekuláris diffúziós együttható 1013 hPa nyomáson és 25°C hőmérsékleten, \vec{v} a szélességvektor, Q_{φ_i} az emisszió, W_{φ_i} adott anyag ülepedése, K_{xx}, K_{yy}, K_{zz} a turbulens diffúziós együttható. A szennyezőanyag koncentráció időbeli változása az a.), az advekciót a b.), a molekuláris diffúziót a c.), a turbulens diffúziót a d.), az emissziót az e.), a kémiai reakciók általi anyag csökkenését vagy veszteségét az f.) és az ülepedést a g.) tag szemlélteti (Pederzoli, 2008).

A CMAQ 5. verziójában használt kémiai mechanizmusok a következők: CB05 (Carbon Bond, 2005 – Szén Kötés Mechanizmus 2005-ös verzió), SAPRC99 és a SAPRC07, ahol a számok az adott kémiai mechanizmus frissítésének évét jelentik. A CB05 kémiai mechanizmust az US EPA fejlesztette 2005-ben, amely egy gáz- és folyadékfázisú légkörkémiai mechanizmus együttes. Biztos alapot nyújt az ózon, a por (PM), a látótávolság, a savas ülepedés és a levegőben található toxikus eredetű anyagok számító gépes modellezéséhez. Több korszerűsítést is tartalmaz a CB04-hez képest, mint

például a 2005-ös verzióban már szerepelnek a klórhoz kapcsolódó kémiai mechanizmusok. Tartalmaz:

- (1) légköri kinematikai és fotolízis adatokat a központi mechanizmusban,
- (2) kémiai mechanizmus kiterjesztését a másodlagos aeroszolok kialakulásával, hogy a PM modellezése jobb legyen,
- (3) több hozzáadott anyag és reakció az illékony szerves vegyületek (VOC) könnyebb kezelésére főleg a toxikus anyagok modellezése esetén,
- (4) leírást a reaktív klór kibocsátás szerepéről a VOC-ok lebomlásában és az szerves kémiában.

A legújabb fejlesztés 51 anyagot és velük kapcsolatos 156 reakciót tartalmaz, amelybe beletartozik az NO, az NO₂, az OH, NO₃ mellett az ózon és még sok más anyag. A CB05 reakció-együttesben szereplő ózonnal kapcsolatos legfontosabb reakciókat az 1. táblázat szemlélteti (Yarwood *et al.*, 2005).

R1	NO ₂	NO + O
R2	O+O ₂ +M	O ₃ + M
R3	O ₃ +NO	NO ₂
R4	O+NO ₂	NO
R5	O+NO ₂	NO ₃
R6	O+NO	NO ₂
R7	NO ₂ +O ₃	NO ₃
R8	O ₃	O
R9	O ₃	O ₁ D
R10	O ₁ D+M	O + M
R11	O ₁ D+H ₂ O	2*OH
R12	O ₃ +OH	HO ₂
R13	O ₃ +HO ₂	OH
R14	NO ₃	NO ₂ + O
R15	NO ₃	NO
R16	NO ₃ +NO	2*NO ₂
R17	NO ₃ +NO ₂	NO + NO ₂
R18	NO ₃ +NO ₂	N ₂ O ₅

1. táblázat. A CB05 kémiai mechanizmusban szereplő néhány ózonnal kapcsolatos reakció és termékük, ahol az első oszlop az adott reakciókat számmal megjelölve, a második a reakcióban részvevő anyagokat, a harmadik pedig a folyamat során keletkezett termékeket mutatja (Yarwood *et al.*, 2005).

A több anyaggal és reakcióval kibővített 2005-ös CB05 fejlesztése nem teszi lehetővé a jobb modell szimulációk készítését a városi területekre. Ezzel ellentétben az új reakciók révén magába foglalja a biogén, toxikus és egyéb anyagokhoz kapcsolódó formációkat és a hozzájuk kapcsolódó savas ülepedést is. Több újítást is tartalmaz a 2004-es változathoz képest: kinetikus frissítéseket, fotolízishez kapcsolódó frissítéseket, több szervetlen reakciót, az etán, a magasabb aldehidek, valamint az alkének jobb légkör kémiai reprezentálását belső kettős kötésekkel, oxigéntartalmú termékeket és terpéneket. A fotolízis adatokat az IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry – Elméleti és Alkalmazott Kémia Nemzetközi Szervezete) becslései és a SAPRC-99 mechanizmus alapján frissítették. Több nitrogén-oxidokhoz tartozó reakciót adtak hozzá a CB05 mechanizmushoz, hogy többnapos időskálán is tudják reprezentálni a NO_x-ek fogyását. A CMAQ modell 3 longnormális eloszlást (nukleációs, akkumulációs és durva fázis) használ az aeroszol méret szerinti eloszlására. A modell aeroszol modulja többféle anyagot is tartalmaz, mint például szulfát, nitrát, ammónium, antropogén másodlagos szerves, antropogén primer szerves, és biogén másodlagos szerves aeroszol, elemi szén, nátrium-klorid és más anyagok. A koagulációt a Brown-mozgás alapján, a kénsav és a vízgőz új részecskéinek képződését pedig homogén nukleációval származtatja. A CMAQ modell aeroszol kémiája lehetővé teszi, hogy a félig illékony szerves vegyületek elpárologjanak a részecske fázisból, így gáz fázisúvá váljanak (*Sarwar et al.*, 2008).

Fotolízis

A nyomgázok fotolízisének (fotodisszociációjának) alapja a légkörben zajló különböző kémiai reakciók. A fotolízis fontos, hiszen szerepet játszik a szmog és a szennyezőanyagok kialakulásában, amelyek hatással lehetnek az emberi egészségre, az állat- és növényvilágra. A fotokémiai reakciók kulcsfontosságúak a levegőminőségi modellekben; ennek megfelelően a CMAQ kémiai transzport modellben is kitüntetett szerepe van a fotolízis reakciók pontos leírásának, amelyek intenzitását a napfény vezérli. A fotolízis mértékének számszerűsítése adott idő alatt a fotolízis folyamatból keletkező anyagok számát jelenti. A fotolízis mértékét több dolog is befolyásolja, mivel a folyamatot a napfény vezérli, így annak mértéke függ az adott napszaktól, évszaktól, a földrajzi szélességtől, valamint a talaj tulajdonságaitól és a felszínborítottságtól; a bejövő napsugárzást pedig befolyásolja többek között a felhőzet, az aeroszol légköri abszorpciója

és szórása. A modell JPROC nevű programegysége számolja ki az időben változó fotolízis mértékét a CCTM számára.

Advekcio

A CCTM-ben az advekcio folyamatát feloszthatjuk horizontális és vertikális komponensekre. A legtöbb esetben a vertikális mozgás összefüggésben van dinamikai és termodinamikai kölcsönhatásokkal. Az advekcio kiszámításában kihasználjuk a tömegmegmaradás törvényét, amit a kontinuitási egyenlet tükröz.

Diffúzió

A CCTM felismeri, a konvektív feltételek mellett – amikor a felszín melegszik – vertikálisan emelkedő meleg levegőt, amely addig emelkedik, míg hőmérséklete el nem éri a környező levegő hőmérsékletét. Ez a folyamat gyors, kis alapterületű felfelé áramló mozgást és lassabb, nagyobb térrészre kiterjedő leáramlást eredményez. A nem konvektív feltételekhez – amikor hűl a felszín – köthető vertikális diffúziót az örvényességi diffúzióval közelíti a modell, amely a levegő keveredését szemlélteti a planetáris határréteg folyamatainak becslése révén. A horizontális örvényességi diffúziót egyenletesnek veszi a modell és feltételezi, hogy függ a modell rácsfelbontásától, ugyanis nagyobb felbontás esetén ez a diffúzió is nagyobb, így a numerikus diffúzió következtében az advekcio folyamata kisebb lesz.

Aeroszol (PM)

Az aeroszol részecskék a levegőminőségi alkalmazásokban, mint PM (particulate matter – apró szemcséjű anyag) szerepelnek. Beszélhetünk elsődleges és másodlagos aeroszorról, előbbi közvetlenül kerül a légkörbe természetes, vagy antropogén forrásból, míg utóbbi a légkörben keletkezik kémiai úton. Száraz és nedves ülepedéssel kerülhetnek ki a légkörből, mindkettőt modellezi a CMAQ. Nedves ülepedés esetében a szennyezőanyag csapadék útján, míg száraz ülepedéskor légköri turbulencia, vagy gravitációs ülepedés révén kerül ki a légkörből. A modellben a száraz ülepedési modul számolja ki az aeroszol részecskék méret szerinti száraz ülepedési sebességét a tömegkoncentrációból. A CMAQ modell CCTM-je a legújabb verziójú aeroszol modult

tartalmazza, amelyben 9 új anyag jelenik meg (széntől eltérő szerves anyag, Al, Ca, Fe, Si, Ti, Mg, K, Mn).

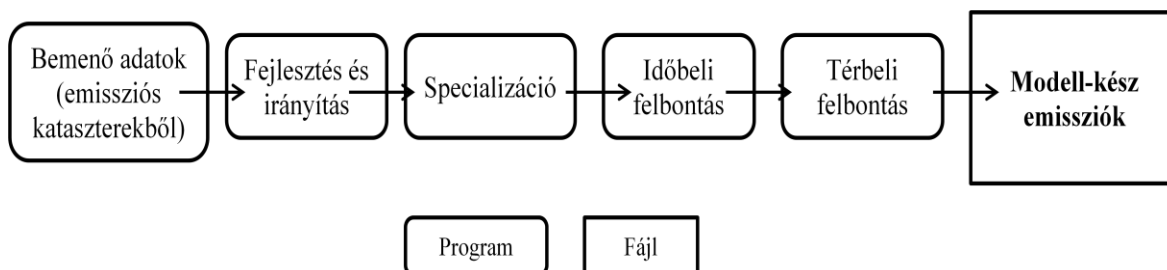
A felhőzetben lejátszódó kémiai folyamatok modellezése

A felhőzet nagyon fontos komponens a levegőminőség modellezésében, kulcsfontosságú szerepe van a vízfázisú kémiai reakciókban, a szennyezőanyagok vertikális keveredésében és a száraz ülepedésükben. A napsugárzás megváltozásán keresztül a felhők közvetve is befolyásolni tudják a kialakult szennyezőanyag koncentrációt, amely hatással van a fotokémiai szennyezőanyagok (pl.: ózon) kialakulására is [1 – cmascenter.org/].

4.2. A SMOKE modell bemutatása

Az Amerikai Környezetvédelmi Ügynökség által fejlesztett SMOKE (The Sparse Matrix Operator Kernel Emissions – Emissziós Kataszter Számító Modell) az egyik legelterjedtebben használt emissziós modell, amely nagy felbontású emissziós adatokat szolgáltat a kémiai transzport modelleknek (*Bieser et al.*, 2011). A nyílt forráskódú SMOKE modell biztosítja az országos szintű bemeneti emissziós adatokat a CMAQ modell számára is [1 – cmascenter.org/]. A rendszer az emissziót két módszer alapján számolja. Az antropogén emisszió számolás a „top-down” közelítéssel történik, amely a felülről-lefelé való megközelítés alapján az adott anyag légköri mennyiségéből indul ki. A másik módszer a „bottom-up”, amely az alulról-felfelé módszert jelenti, ahol elemi folyamatokból indul ki. Ilyen módszer alapján számolja például a biogén forrásokból származó emissziót. A modell a különböző forrásokból (légköri, pont, mobil vagy biogén) származó emissziót egyetlen output fájlba egyesíti. A rendszer futtatásához szükség van bizonyos meteorológiai bemenő adatokra is, mint például a nedvesség, a hőmérséklet, vagy a szél. Az európai emissziós kataszterek (a különböző forrásokból származó légszennyező anyagok fajtáinak és kibocsátásuk mértékének forrástípus szerinti területi nyilvántartása) és adatbázisok azonban nagyon különbözőek. Az országok eltérő módszertan alapján becsülik meg a nemzeti kibocsátásukat, amellyel eltérő nemzeti emissziós kataszterek jönnek létre. Ennek eredményeképpen a különböző nemzeti emissziós kataszterekben különböző emissziós tényezőket használhatnak hasonló források esetén, így különböző

forráskategóriák jöhetnek létre. Azok az országok, amelyek közzéteszik a saját emissziós katasztereiket, a szükséges adatokat egy térkép vetületi transzformációval ábrázolják (Bieser *et al.*, 2011). A SMOKE modell folyamatábráját a 10. ábrán láthatjuk [10 – cmascenter.org/].



10. ábra. A SMOKE emissziós modell folyamatábrája, ahol a nyilak az egymás után következő folyamatokat jelölik [10 – cmascenter.org/].

Minden forrástípus esetében a modell a következő feladatokat hajtja végre:

- (1) beolvassa az emissziós kataszterek adat fájljait,
- (2) növeli a kibocsátást a kiinduló (bázis) évhez képest a modellezett évre (lehet múltbeli, de jövőbeli év is) ha szükséges (kivétel a biogén forrás esetén),
- (3) átalakítja a kataszterekből származó anyagokat a levegőminőségi modell által definiált kémiai mechanizmus alapján,
- (4) ellenőrzi a kibocsátást (kivéve biogén forrás esetén),
- (5) létrehozza a kibocsátások időbeli felbontását (itt a meteorológiai inputokat is számításba veszi),
- (6) majd a térbeli felbontás létrehozása következik,
- (7) egyesíti a különböző forrású kibocsátásokat egyetlen fájlba, amire a levegőminőségi modellnek bemeneti adatként lesz szükséges,
- (8) minden lépés után elvégzi egyfajta ellenőrzést a kapott adatokon és eredményeken.

Annak érdekében, hogy a modell nagy térbeli felbontással tudjon dolgozni, összegzett kibocsátás halmazokat használ adott régiókra, amelyeket aztán szétoszt a rácsfelbontás függvényében. Ezt a feladatot a *GRDMAT* modul végzi, amely így egy állandó rács mátrixot (amelynek neve szintén *GRDMAT*) hoz létre minden évre. A módszer jó, mert a források térben állandóak (pl.: a mobil források az úthálózattal egész évben kapcsolatban vannak). A *MODMAT* mátrix módosítja ezt a *GRDMAT* mátrixot. A

(4) egyenlet alapján az egyes anyagok összmennyisége mindig 1, ha a modellezett területen belül helyezkednek el.

$$\sum_{i=1}^N GRDMAT(i) = 1, \quad (4)$$

ahol N a rácscellák száma. Ez igaz minden módosító mátrix átlagára (5) is, ahol T az időlépések száma (365 nap/év), de nem igaz egy napi módosító mátrixra (6).

$$\frac{\sum_{i=1}^N [\sum_{j=1}^T MODMAT(i,j)]}{T} = 1, \quad (5)$$

$$\sum_{j=1}^T MODMAT(i,j) \in (0, T) \quad . \quad (6)$$

A (7) egyenlet adja meg az egyes anyagok adott rácspontban lévő kibocsátását órás felbontásban $g s^{-1}$ vagy $mol s^{-1}$ mértékegységben, ahol $GRDMAT(x, y)$ a rácsmátrix, $SPCMAT(x, y)$ a „fejlődő mátrix”, $EP(z)$ az egydimenziós emissziós mátrix, $TMPFAC(t)$ az időbeli tényező és TOT az éves teljes emisszió (a horizontális dimenziók x és y helyettesíthető a rácscellák számával (n)).

$$E(t, x, y, z) = GRDMAT(x, y) \cdot SPCMAT(x, y) \cdot EP(z) \cdot TMPFAC(t) \cdot TOT. \quad (7)$$

A (8) egyenlet különálló rácsmátrixokat számol minden napra, ahol a $CHGMAT(n, t)$ változó mátrix, amelyet külső fájlokból számol a modell.

$$MODMAT(n, t) = \frac{GRDMAT(n) \cdot CHGMAT(n, t) \cdot T \cdot \sum_{i=1}^N [GRDMAT(i)]}{NORMAT(n)}. \quad (8)$$

A $GRDMAT(n)$ mátrixot és a $CHGMAT(n, t)$ mátrixot összeszorozva minden egyes napra megkapjuk a normalizált mátrixot ((9) egyenlet).

$$NORMAT(n) = \sum_{i=1}^N [GRDMAT(i) \cdot \sum_{j=1}^T [CHGMAT(i, j)]] . \quad (9)$$

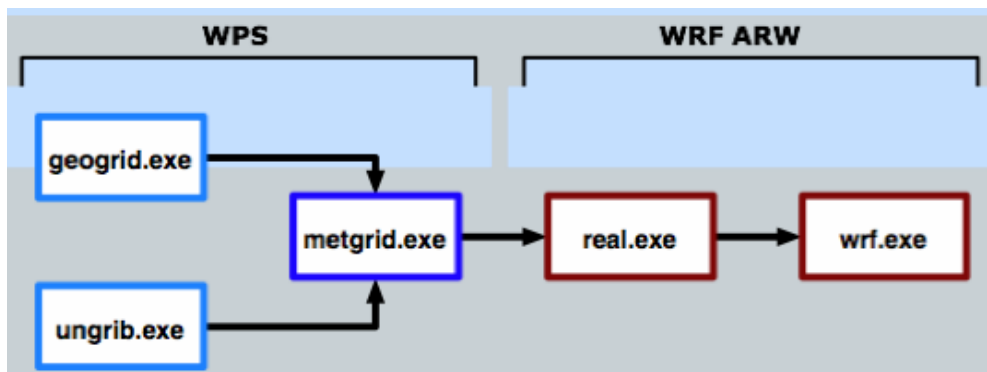
Mialatt az éves teljes kibocsátás állandó marad a térbeli és az időbeli felosztás változik. Az eredetileg alkalmazott havi profilok feleslegessé válnak, mivel ezek a 365 napi módosított mátrixokban benne vannak (Bieser *et al.*, 2011).

4.3. A modellező rendszer harmadik tagja a WRF-ARW

A WRF (Weather Research and Forecasting Model – Időjárás Kutató és Előrejelző Modell) numerikus időjárás előrejelző modell szabadon hozzáférhető és használható. A modellt az NCAR (National Center for Atmospheric Research – Nemzeti Légkör Kutató Központ), a NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration – Amerikai Nemzeti Óceáni és Meteorológiai Szolgálat), több egyetem és kutatóintézet fejleszti. Szerte a világban használják oktatási, kutatási (pl. hurrikánkutatás) és előrejelzési célokra is [5 – met.hu/, 11 – mmm.ucar.edu/].

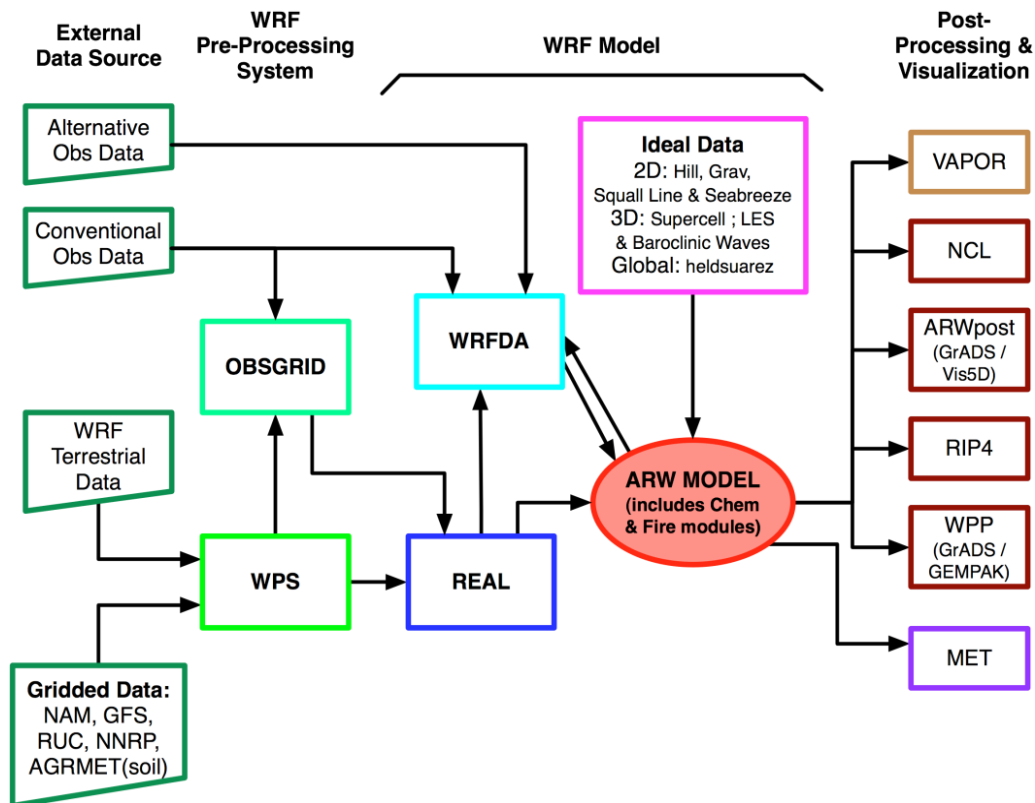
A modell két dinamikai megoldó felülettel rendelkezik, amelyek a következők: WRF ARW (Advanced Research – „Fejlett Kutató” Modell), amelyet az NCAR fejlesztett, illetve a WRF NMM (Nonhydrostatic Mesoscale Model – Nemhidrosztatikus Mezokálájú Modell), amelyet az NOAA fejlesztett. A WRF-ARW modell folyamatábráját a 11. ábra szemlélteti, amelyen a modell fő programegységei láthatóak: (1) WPS (Pre-Processing System) – WRF előfeldolgozó rendszer, (2) WRF 3D VAR, (3) ARW megoldó szegmens, (4) utófeldolgozás, grafikus megjelenítés (Wendl, 2009). A WRF előfeldolgozó rendszer definiálja a felhasználó által megadott horizontális modelltartományt (Nagy, 2010), amelyre interpolálja a felszíni adatokat (talajtípus, földhasználat típusa, amelyet a `geogrid.exe` program állít elő), illetve a más modellekből nyert meteorológiai adatokat, amelyeket a `metgrid.exe` program interpolál horizontálisan a megadott területre, majd a folyamat során előállítja a kezdeti feltételeket (inputokat) a WRF modell számára. Ezután ezek az input adatok kerülnek be a WRF-ARW modellbe, ahol a `real.exe` elvégzi az adatok vertikális interpolációját, majd a `wrf.exe` elkészíti az előrejelzést. A munkamenetet a 11. ábra szemlélteti. A 3D VAR – 3D variációs adatasszimiláció – teszi lehetővé, hogy a megfigyeléseket is össze lehessen hangolni a WRF által előállított analízis mezőkkel. Az ARW megoldó szegmense különböző

inicializáló programokat tartalmaz különböző valós és idealizált adatokkal történő szimulációkra. Ennek része a numerikus integrálást végző program. A megoldó szegmens NetCDF formátumban adja meg az eredményeket, amelyeket többféle ábrázoló program segítségével is megjeleníthetünk (ilyen például a GrADS – The Grid Analysis and Display System) (Wendl, 2009).



11. ábra. Az előfeldolgozó rendszer (WPS) és a WRF-ARW modell rendszere. Elsőként a WPS előállítja a kezdeti feltételeket a modell számára, majd ezek az input adatok kerülnek be a WRF-ARW modellbe, ahol a `real.exe` elvégzi az adatok vertikális interpolációját, majd a `wrf.exe` elkészíti az előrejelzést. (Wendl, 2009).

A modellben szereplő egyenletek nem hidrosztatikus, Euler alakban, hibrid éta-koordináta-rendszerben vannak felírva, teljesen összenyomható légkörre. Felületei a talaj közelében követik a felszín változásait, majd a felsőbb légkörben fokozatosan párhuzamossá válnak a nyomási felületekkel. A WRF modell rendszerének részletes folyamatábráját a 12. ábra szemlélteti (Nagy, 2010). A modell futtatható valós idejű adat inicializációjával (real-data initialization), vagy idealizált esettel.



12. ábra. A WRF modell rendszerének folyamatábrája [12 – mmm.ucar.edu/].

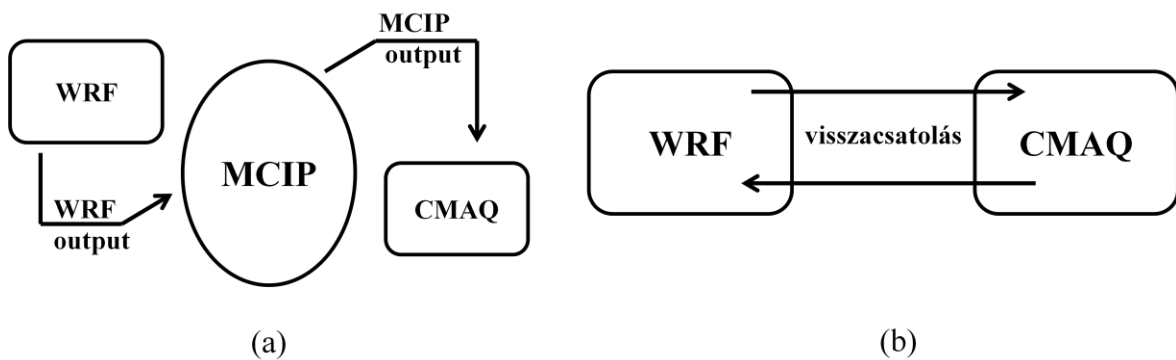
Az `ideal.F` és `real_em.F` programok (a 12. ábrán a kék és rózsaszín téglalapok) biztosítják a modell számára a bementi fájlokat és ha szükséges a határfeltételeket. Ez magába foglalja a hidrosztatikus egyensúly beállítását, továbbá a WRF változók kezdeti 3D-s és 2D-s mezőinek a megadását. A 12. ábrán látható WRF előfeldolgozó rendszere definiál egy WRF rácsot, létrehoz egy térképet, valamint tartalmazza a felszíni és magassági (dombok, hegyek) információkat. Valós idejű előrejelzést/analízist készít más modell adataiból, majd interpolálja az adatokat a WRF rácsra. Az időfüggő analízisek 3D-s szélből, potenciális hőmérsékletből, vízgőztartalomtól és számos 2D-s mezőből állnak [12 – mmm.ucar.edu/].

4.4. A WRF-CMAQ-SMOKE modellező rendszer

A levegőtisztasági modellek fő célja kapcsolatot létesíteni a meteorológia, a kémiai átalakulások, a kémiai anyagok emissziója és az átalakulási folyamatok között

[1 – cmascenr.org/]. A levegőminőségi modellek, mint a CMAQ, meteorológiai bemenő adatokat igényelnek, amelyek a modell kémiai és a nyomanyag szállítás szimulációjához szükségesek. Beszélhetünk egyirányú és kétirányú csatolt rendszerekről. Az egyirányú csatolt rendszerekre jellemző a mentett meteorológiai input adatok túlzott időbeli interpolációja és a légköri szennyezők visszacsatolásainak hiánya. Ezek kiküszöbölésére fejlesztették ki a kétirányú rendszereket (13. ábra). A CMAQ is egy ilyen kétirányú csatolt rendszer, ami biztosítja a felhasználó számára a rugalmasságot: (1) a felhasználó úgy tudja beállítani a WRF és a CMAQ modellt, hogy egyensúly legyen a szimuláció pontossága és a rendszer számítási ideje között, valamint (2) a kétirányú csatolt rendszernek köszönhetően tanulmányozhatja a gázok és aeroszol visszacsatolásait a meteorológiai folyamatokra a rövidhullámú sugárzáson keresztül. A kétirányú modellek sugárzási visszacsatolásainak köszönhetően észrevehetően csökken az eltérés a szimuláció során a felszíni rövidhullámú sugárzás és a 2 m-es felszíni hőmérséklet kapcsolata között és szintén javul az ózon és PM_{2.5} viszonylagos és mért mennyisége közötti kapcsolat a tesztek alapján.

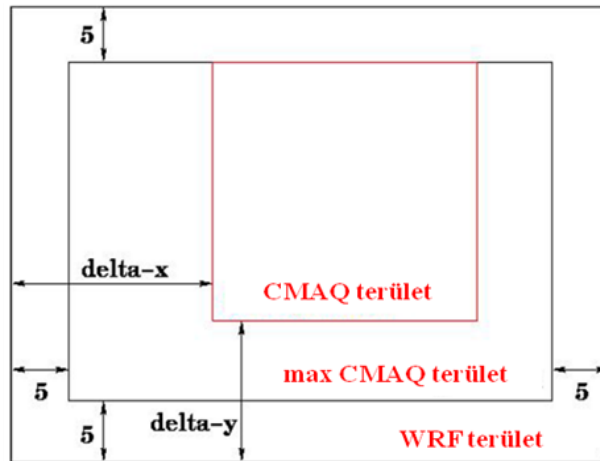
Beszélhetünk 3D-s kémiai transzport modellekről, amelyeket levegőminőségi kutatásokra és szabályozási célokra is használnak. Ezek a modellek 3D-s bemenő meteorológiai adatokat igényelnek, amelyeket a meteorológiai modellek biztosítanak a számukra. A kémiai transzport modellek és a meteorológiai modellek eltérnek egymástól az alkalmazott numerikus és számítógépes technika alapján. Meteorológiai modelleket általában nem építenek levegőminőségi szimulációs célokra, ezért a két modell térképvetülete, koordináta-rendszere, rácsfelbontása és rétegek szerkezete is különböző lehet. A CMAQ modell kémiai transzport modellje (CCTM), az MCIP segítségével hidalja át ezeket a problémákat, úgy hogy a transzformáció során megfelelően alakítja át a meteorológiai adatokat a modell számára. Ez a transzformáció tartalmazza a mértékegység és a formai átalakítást, a vertikális rácsfelbontáshoz tartozó interpolációt, valamint számításokat, hogy olyan diagnosztikai változókat hozzon létre, amelyek nincsenek benne a meteorológiai modell output adataiban, de a CMAQ modell számára szükségesek. Tehát először lefut a meteorológiai modell, amely során meteorológiai outputokat kapunk, majd ennek felhasználásával lefut az MCIP, és ennek az output adatait használja majd fel a CCTM, ezt szemlélteti a 13. (a) ábra. E két modell között off-line kapcsolat van.



13. ábra. A WRF – CMAQ off-line rendszer sematikus ábrája (a) és a két rendszer kétirányú kapcsolása (b) (Wong *et al.*, 2011).

A CMAQ modell integrálási időlépcsője általában sokkal finomabb, mint a rendelkezésre álló óras meteorológiai adatoké. Az interpoláció pontossága fontos a meteorológiai változók esetében, mint például a szélirány vagy szélesség, amelyek kulcsfontosságú változók a szennyezőanyag terjedése és ülepedése szempontjából. A modell képes kiszámolni a koncentrációt, a szennyezőanyagok összetételét és az aeroszol méret szerinti eloszlását a légkörben. Az aeroszol jelenléte a légkörben nagyon fontos, hiszen kihatással van a sugárzásra, ami viszont hatással van a fotolízis mértékére, ami pedig megszabja a légköri fotokémiai folyamatokat és közvetett módon a felszíni hőmérsékletet, ez viszont hatással lehet a légköri kémiai reakciókra, a konvekció erősségére, s így a planetáris határreteg magasságára, ahol a szennyezőanyagok hígulása és diszperziója, valamint a felhőképződés zajlik. Az ilyen visszacsatolások nélkül (13. (b) ábra) a meteorológiai modell nem lenne fizikailag reális (Wong *et al.*, 2011).

A modellterület horizontális és vertikális kiterjedésének meghatározása után futtatható a meteorológiai modell, amelynek horizontális futtatási területe nagyobb, mint a CMAQ modellben megadott terület, amit jól szemléltet a 14. ábra. A kettő közötti arány általában 3:1. A CMAQ modell területének minden oldalán legalább 4 rácscellának kell lennie [1 – cmascenter.org/]. A 14. ábrán az is látszik, hogy a felhasználónak meg kell adnia a delta_x és delta_y mennyiségeket is, amelyek a CMAQ modellterületnek a WRF modellterülettől vett távolságát adják meg (Wong *et al.*, 2011).



14. ábra. A WRF és a CMAQ modell területének aránya a kapcsolt rendszerben, ahol delta_x és delta_y a CMAQ modellterületének távolsága a WRF modellterületétől. Az ábrán látható a CMAQ modell maximális modellterülete a WRF modellterületének függvényében (Wong *et al.*, 2011).

Egy új modellszimuláció elkészítéséhez tehát szükség van a horizontális és vertikális rácsszerkezet és a kémiai mechanizmus megadására. A horizontális koordináta-rendszer az input meteorológiai modell mezőiből adódik, amely tárolva van az MCIP programegység input fájljainak fejlécében. A WRF támogatja a Lambert szögtartó, a poláris sztereografikus és a Mercator vetületeket is, amelyeket a CMAQ modell rendszere is használ [1 – cmascenter.org/], ennek megfelelően olyan lesz az output adatok térképvetülete, amelyet a WRF modell készít. Mindkét modell az Arakawa-féle C horizontális rácsot használja. A WRF modell vertikális koordináta-rendszerének alapja a hidrosztatikus szigma koordináta-rendszer, amelynek egy módosított/kiterjesztett változatát használja a CMAQ modell is (Wong *et al.*, 2011).

A WRF, a SMOKE és CMAQ modellező rendszer segítségével vizsgálták a modellfelbontás hatását a modellszimulációk eredményeire. A WRF-UCM (Weather Research and Forecasting model coupled with an urban canopy model – a WRF modell összecsatolása egy városi lombkorona modellel) és CMAQ modellező rendszert többféle (13,5; 4,5; 1,5; 0,5 km-es) horizontális felbontásban is futtatták egy olyan időszakra, amikor ÉK Marylandben (USA) a 8 órás átlagos maximális ózonkoncentráció elérte a 125 ppb-t (oka: a Chesapeake-öböl parti szele gyengébb volt). Ezt követően a CMAQ outputjainak eredményeit összevetették az AIRNow rendszer észlelt ózon adataival (Loughner *et al.*, 2009). A rendszer számára az input emissziós adatokat a SMOKE modell

szolgáltatta. Az AIRNow rendszert az EPA fejlesztette ki abból a célból, hogy segítse a légköri levegőminőségi információk könnyebb elérhetőségét. Honlapján ózon és PM térképek, valamint városi levegőminőségi előrejelzések találhatóak (Dye et al., 2004). A rendszert az Amerikai Egyesült Államok több államában is alkalmazzák, azonban nem minden esetben a WRF modell biztosítja az input bemeneti meteorológiai adatokat. Lee et al. (2007) alapján Arizona területére (főleg a Phoenix medencében) végeztek ózonkoncentráció vizsgálatokat, ahol a rendszernek az input meteorológiai adatokat az MM5 modell biztosította.

5.A CMAQ, a SMOKE és a WRF-ARW modell telepítése, a kapott eredmények bemutatása

5.1. A CMAQ modell telepítése és a tesztfuttatásának bemutatása

A diplomamunka során telepítettük, majd futtattuk a CMAQ modell rendszerét az Atlasz szerveren található saját könyvtárban a honlapon [1 – cmascenter.org/] lévő használati útmutató alapján. A telepítés után sikeresen megtörtént a tesztfuttatás is, a modellben lévő tesztadatokkal, majd ezeket az eredményeket összehasonlítottuk a modellcsomaghoz kapott referencia eredményekkel. Az általunk kapott eredmények és a referenciaeredmények azonosak lettek, a modellt sikeresen telepítettük, és futtattuk.

A modell telepítéséhez majd sikeres futtatásához szükséges volt az I/O API (Programming Interface – programozói felület) és a NetCDF (CMAQ fájlok formátuma) könyvtárakra is. Ezek sikeres telepítése után került sor a CMAQ forráskódjának, a scripteknek és a tesztfuttatáshoz szükséges adatoknak a letöltésére. A honlapról a következő tar fájlokat kellett letölteni:

`CMAQv5.0.1.tar.gz` – tartalmazza a modellt, a hozzá szükséges eszközök és könyvtárak forráskódjának archívumát,

`CMAQv5.0.1.twoway.09-2012.tar.gz` – szükséges a WRF és a CMAQ modell későbbi kétirányú összekapcsolásához,

`DATA_REF.CMAQv5.0.1.tar.gz` – tartalmazza a C-shell scripteket a CMAQ felépítéséhez és a modellfuttatáshoz,

SCRIPTS.CMAQv5.0.1.tar.gz – C-shell scripteket tartalmazza,

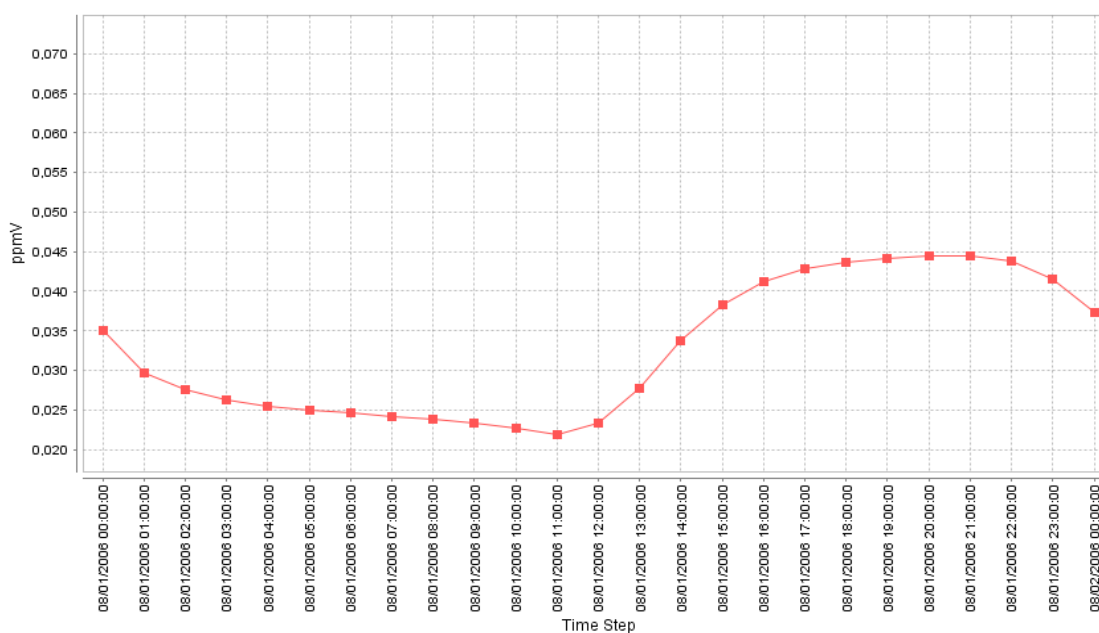
DATA.CMAQv5.0.1.tar.gz – referencia adatok tartalmazó fájl.

A főkönyvtárban belül (a saját könyvtár az Atlasz szerveren belül) a letöltött fájlok kicsomagolása után létrejött egy `scripts` (a program egységek felépítéséhez és futtatásához szükséges scripteket tartalmazó), egy `models` (a modell forráskódját tartalmazó), egy `data` (a modell input és output könyvtárait tartalmazó), valamint egy `lib` (a CMAQ felépítéséhez szükséges bináris fájlokat tartalmazó) könyvtár. Ezután a programegységek/processzorok megfelelő könyvtárban és megfelelő sorrendben (Bldmake, STENEX, PARIO, JPROC, ICON, BCON, MCIP, CCTM) történő „lefordítása” következett. A következő lépés a tesztfuttatás volt. A CCTM futtatásához szükséges input adatok létrehozása a különböző processzorok scriptjeinek futtatásával történt, ahol elsőnek az MCIP programegységet kellett futtatni, amely a meteorológiai adatokat tartalmazza. Az MCIP futtatása után az ICON, BCON, majd JPROC programegységek futtatása következett (`cd $M3HOME/scripts/icon,./run.icon >&! icon.log`, ahol az M3HOME az adott főkönyvtár, az *icon.log* fájlban pedig megtekinthetjük a futtatás eredményességét, hasonló módon megismételjük a BCON és a JPROC processzorok esetében is). Természetesen a CCTM futtatása a legutolsó, hiszen az előbbi programegységek outputjai biztosítják számára az input adatokat. Be kellett állítani a felhasznált processzorok számát a párhuzamos feldolgozáshoz az NPROCS (`setenv NPROCS 6`) és a NPCOL_NPROW (`setenv NPCOL_NPROW "3 2"`) változók segítségével, amennyiben nem multiprocesszoros futtatást szeretnénk akkor az NPROCS száma 1 lesz. Ezután létrejöttek a kívánt outputok, amelyeket a modellcsomagban megadott referenciaadatokkal összevetve nem találtunk különbséget.

A tesztfuttatás 2006. augusztus 1. 00 UTC és 2006. augusztus 2. 00 UTC között, 127 (oszlop) x 122 (sor) rácspontra és 35 vertikális modellszintre történt 12 km-es horizontális felbontással az Amerikai Egyesült Államok délkeleti területére. A CHEMMECH programegység hozza létre azokat a fájlokat, amelyek definiálják a modellfuttatásban használt gáz fázisú kémiai mechanizmusokat. Ebben az esetben felhasznált gáz fázisú CB05 kémiai mechanizmus (a 4. fejezetben részletesebben tárgyalt) tartalmazza a klórhoz kapcsolódó kémiát, a toluolhoz tartozó kémiai mechanizmusokat, aeroszol kémiát, valamint víz/felhő kémiát. A következőkben megjelenítettem néhány ábrát a tesztfuttatás eredményeiből. Az eredményeket a VERDI megjelenítő program segítségével készítettem el, amely Windows rendszer alatt futó program. A saját személyi

számítógépre telepítettem, majd a kapott output adatokat ábrázoltam vele. Felhasználói útmutatója szintén megtalálható a CMAQ modell honlapján [13 – cmascenter.org/].

A következőkben bemutatom a CMAQ modell tesztfuttatási eredményein keresztül, hogy mutatkozik meg a felszínközeli ózonkoncentráció napi menete az adott időszak alatt, miként változik ez idő alatt az NO koncentráció a járműforgalom reggeli elindulására, majd esti leállítására. A 15. ábrán a felszín közeli átlagos ózonkoncentráció napi menetét láthatjuk a vizsgált területre, ppmV (parts per million by volume – milliomod térfogatrész) mértékegységben megadva. Annyit azonban meg kell jegyezzünk, hogy az ábra *x*-tengelyén az idő UTC-ben van kifejezve, azonban amennyiben a helyi időt akarjuk megkapni akkor az időzónák alapján ki kell vonnunk 5 órát minden időpontból (ez a terület a Greenwichi Királyi Csillagvizsgálón átmenő főkörtől nyugatra helyezkedik el). Ennek megfelelően az ózon napi menetének alakulása már jobban érthető.



15. ábra. Az ózonkoncentráció átlagos napi menete (piros vonallal jelölve) a felszín közelében, az egész futtatási területre ppmV mértékegységben megadva.

Megjegyzendő, hogy az *x*-tengelyen UTC-ben jelenik meg az idő, amely nem egyenlő a helyi idővel (5 órát ki kell vonni, hogy a helyi időt kapjuk).

Kora reggel (ez az ábra alapján 11 UTC, ami helyi idő szerint reggel 6 óra), amikor beindul a forgalom és megjelenik a járművekből származó NO_x, az ózonkoncentráció lecsökken a kémiai folyamatok (nyelők) révén. Ezután nem sokkal (az ábrán 12 UTC-kor, ami helyi

idő szerint reggel 7 óra) elkezd nőni az ózonkoncentráció, ugyanis az NO és az O₃ reakciójából NO₂ keletkezik, amely fény hatására szétbomlik NO-ra és O-ra, majd ez az O reakcióba lép egy O₂-vel és ismét ózon keletkezik. Az ábrán a maximumot 21 UTC körül éri el a felszínközeli ózonkoncentráció, ami helyi idő szerint délután 16 óra. Bozó *et al.* (2006) alapján a NO₂ fotolízise (fény hatására történő bomlása) során atomos oxigén keletkezik, amely második lépésben ózont eredményez. A reakciót és a reakció sebességét szemlélteti a (10) és (11) egyenlet.



$$-\frac{d[NO_2]}{dt} = \frac{d[NO]}{dt} = k_1[NO_2], \quad (11)$$

ahol t az idő, k_1 a reakció sebességi állandója. Ebből következik, hogy a kiindulási anyag és a végtermék koncentrációja egyenlő. A fentebbi reakcióban keletkezett NO fogyasztásának reakcióegyenletét mutatja a (12) egyenlet (a nitrogén-monoxid nitrogén-dioxiddá való alakulása igen gyors folyamat):



amely alapján a NO₂ keletkezése felírható a következő módon ((13) egyenlet):

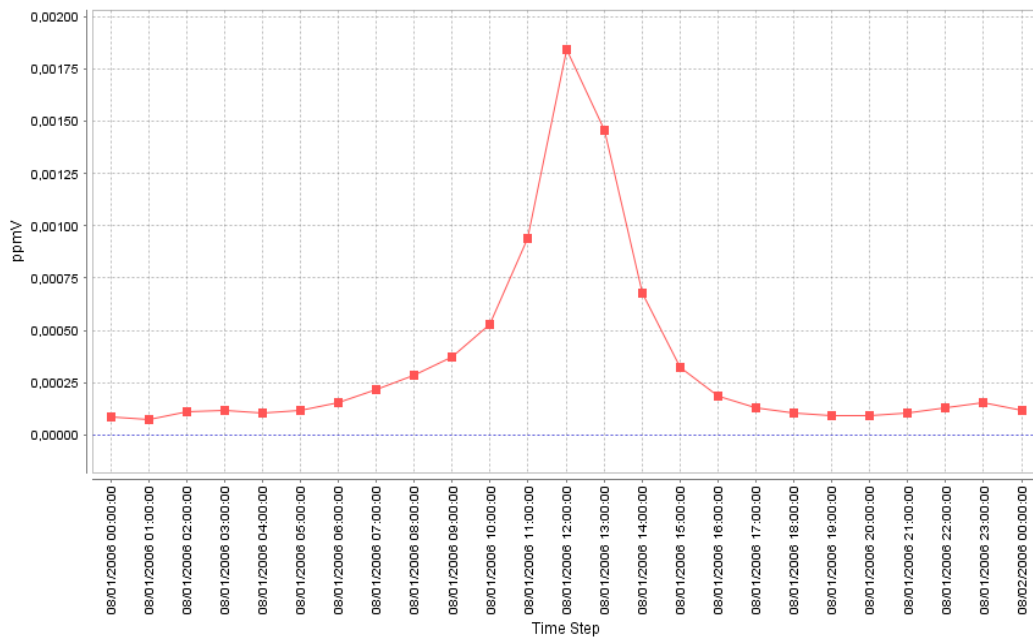
$$\frac{d[NO_2]}{dt} = k_2[NO][O_3], \quad (13)$$

ahol k_2 a másodrendű kémiai reakciósebesség. Ebből következik, hogy a NO₂ koncentrációjának időbeli változását a fogyasztásnak és keletkezésének különbsége adja. Az egyenletek lehetővé teszik az ózon egyensúlyi koncentrációjának kiszámítását is (ekkor a fogyás és keletkezés egymással egyenlő), amelyet a (14) egyenlet ad meg.

$$[O_3] = \frac{k_1[NO_2]}{k_2[NO]}. \quad (14)$$

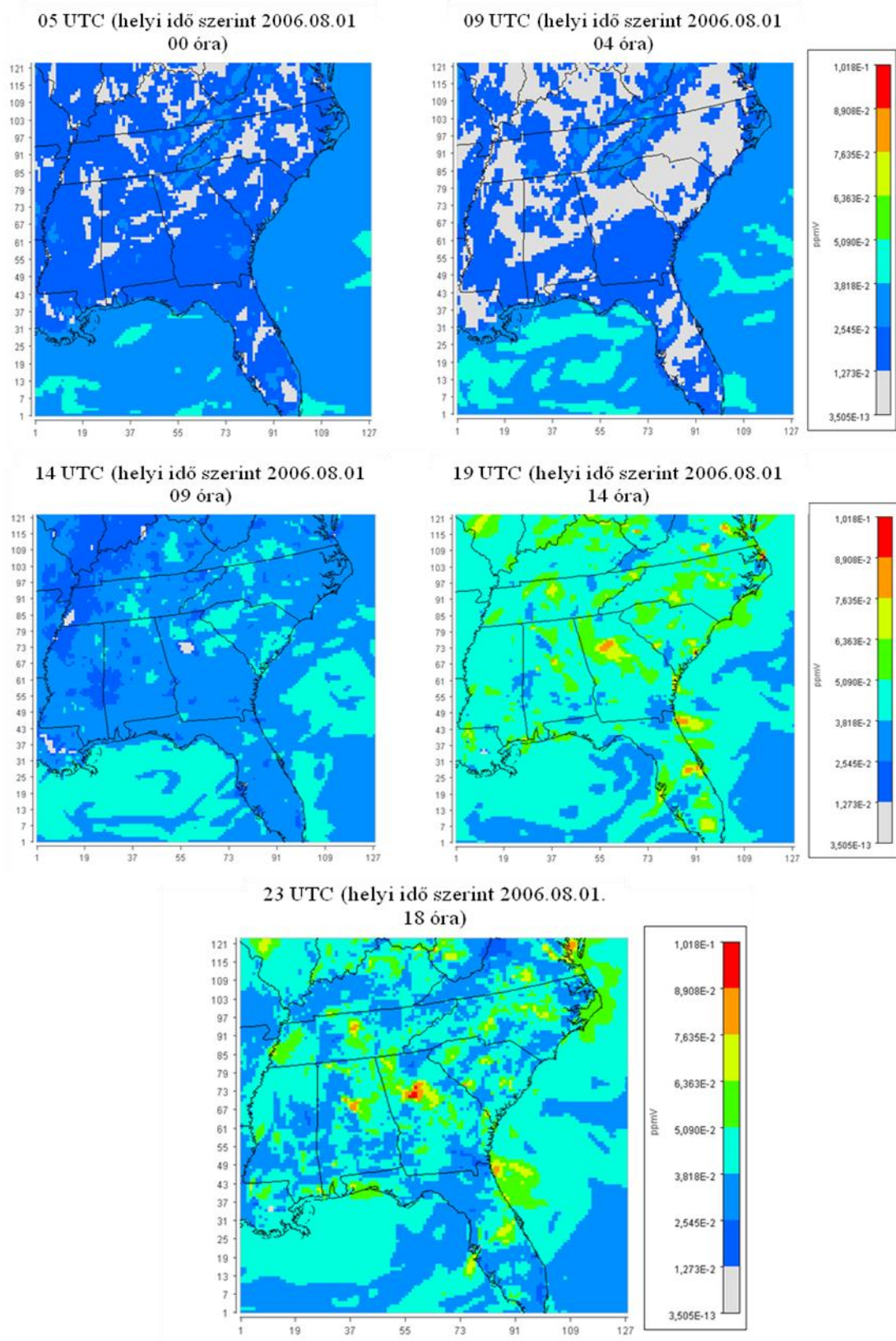
Az utóbbi egyenlet alapján az O₃ koncentráció mennyisége az NO₂ koncentrációjának mennyiségével egyenesen (ezt a kapcsolatot szemlélteti a 19. ábra), az NO

koncentrációjának mennyiségével pedig fordítottan arányos (Bozó *et al.*, 2006). A 16. ábra szemlélteti az NO napi menetét az USA délkeleti területére (modellezett terület), ahol az idő UTC-ben értendő (a helyi idő 5 órával kevesebb). A 16. ábra alapján az NO koncentráció a maximumát helyi idő szerint reggel 7 órakor éri el, amely valószínűleg a reggel beinduló nagy járműforgalomnak köszönhető.



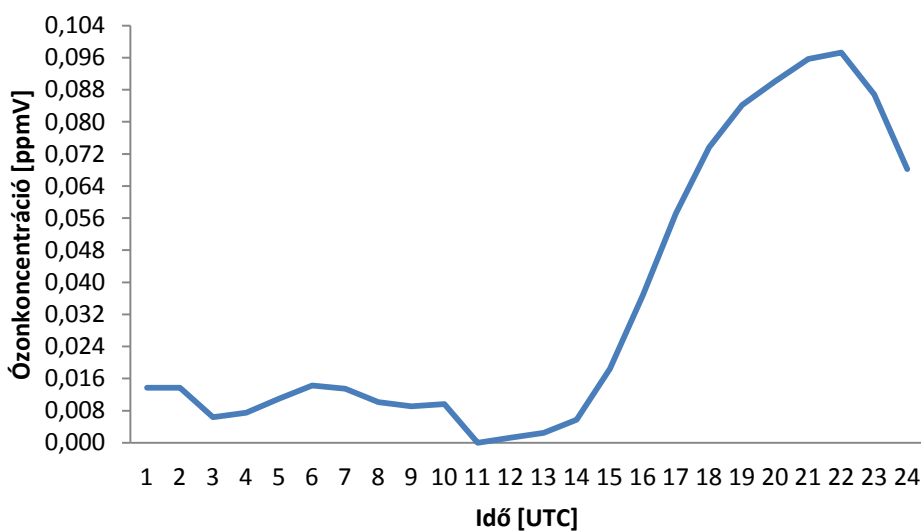
16. ábra. Az átlagos nitrogén-monoxid koncentráció [ppmV] napi menete, az ábrán piros vonallal jelölve, a modellezett területre. Az *x*-tengelyen az idő UTC-ben értendő.

A 17. ábra szemlélteti az ózonkoncentráció változásának napi menetét az adott területre, az ábrason balról jobbra haladva 05, 09, 14, 19 és 23 UTC-kor. A legnagyobb értékeket a kora esti órákban (23 UTC-kor, azaz helyi idő szerint 18 órakor) adta a modell, a fentebbi leírt mechanizmus alapján.



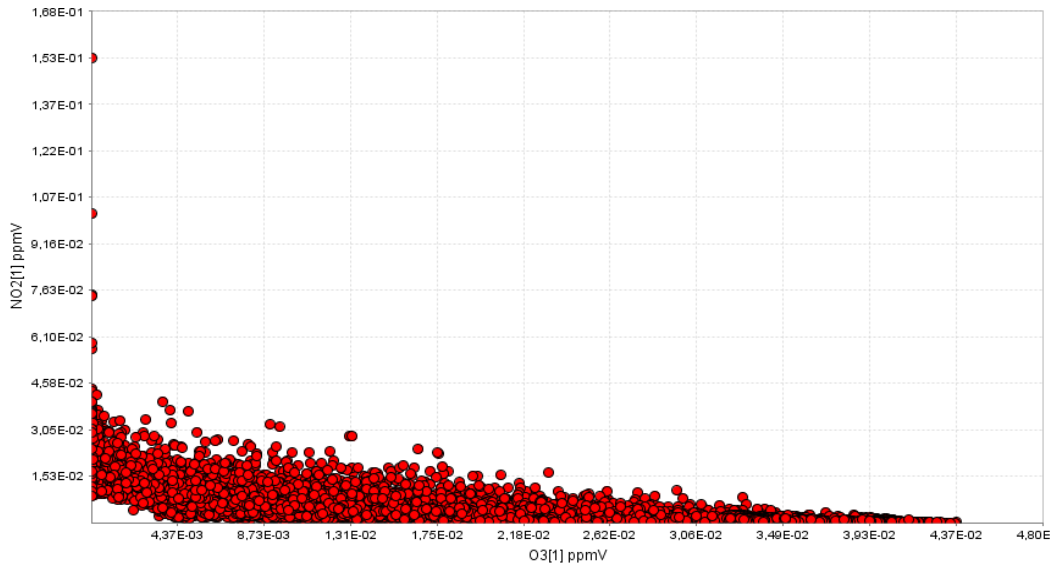
17. ábra. Az ózonkoncentráció változása a modellezett területre ppmV mértékegységben, az első modellezett szintre, amely megközelítőleg a felszint jelenti. Az első képtől kezdve balról jobbra haladva az O₃ koncentráció 05, 09, 14, 19 és 23 UTC-kor (helyi idő szerint 00, 04, 09, 14 és 18 órakor).

A 17. ábra térképein kirajzolódnak a nagyvárosok, ahol a nagyobb gépjárműforgalom miatt megnő az NO és az NO₂ mennyisége, így a felszíni ózonkoncentráció is jelentős napi menetet mutat. Az ábrsorozaton még az is kivehető, hogy 19 és 23 UTC között (helyi időben 14 és 18 óra között) a modellezett terület közepén nagyon magas ózonkoncentráció található. A VERDI megjelenítő program a modellezett terület adott pontját sor-oszlop szerint kiírja, de beállítható, hogy az adott pont földrajzi koordinátáit mutassa. Ez alapján meghatározható, hogy a modell által adott nagy értékek (piros színezésű terület a 17. ábrán), Atlanta városát és annak környező területeit jelentik. A megjelenítő programból adott pontra – legyen az akár sor-oszlop, vagy szélesség-hosszúságként jelölve – kinyerhető a modell által számított koncentráció érték, így Atlantára készíthető napi ózonkoncentráció menet is. A 18. ábrán az ózonkoncentráció [ppmV] napi menete szerepel Atlantára (modellezett rácshálózaton a 73. sor, 57. oszlop által kimetszett pontra).



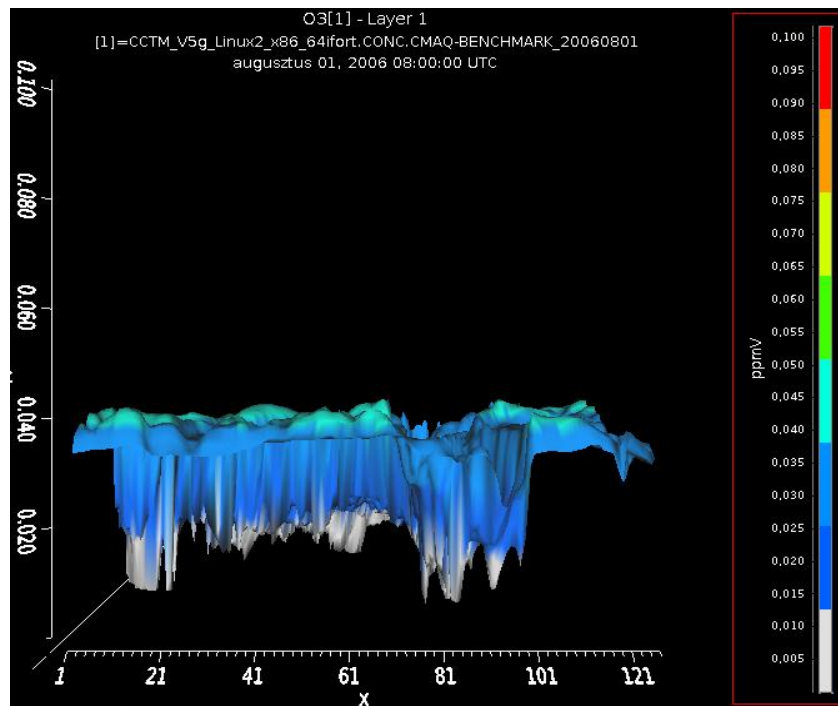
18. ábra. Az ózonkoncentráció (kék vonallal jelölve, ppmV mértékegységben) napi menete a felszín közelében Atlanta területére. Az x -tengelyen az idő UTC-ben van feltüntetve.

A készíthetünk scatter plot diagramokat is, egy ilyen mutat be a 19. ábra, ahol az átlagos ózon- és a nitrogén-dioxid koncentráció [ppmV] kapcsolata jelenik meg a modell-területre.

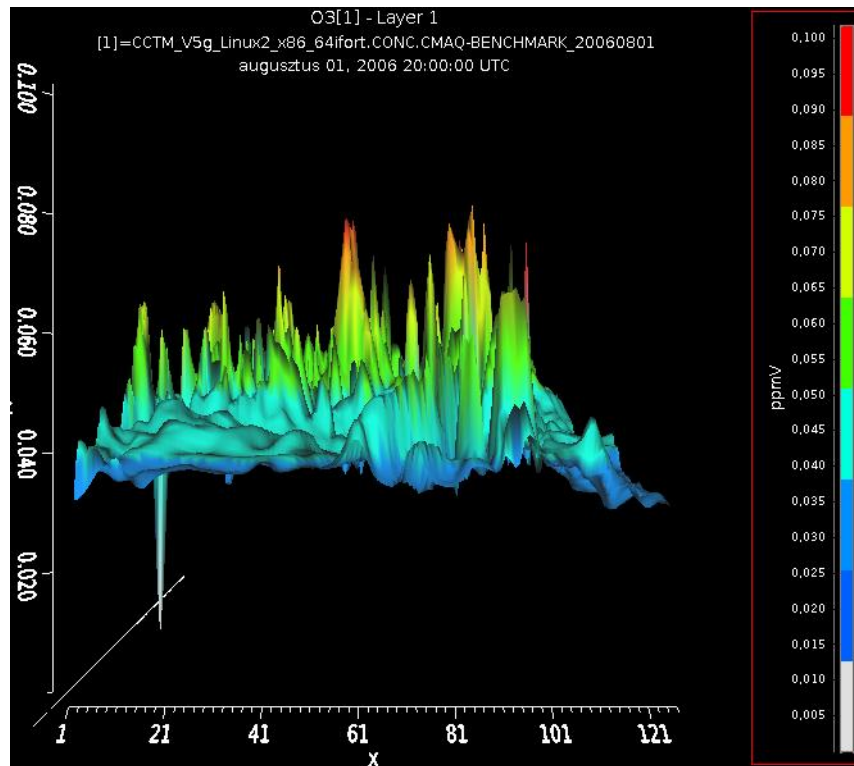


19. ábra. A modellezett terület ózon [ppmV] és a nitrogén-dioxid [ppmV] scatter plot diagramja a felszín közelében 2006. augusztus 1-én helyi idő szerint reggel 6 órakor (11 UTC).

A megjelenítő program lehetővé teszi a modellezett területre 3D-s ábrák készítését is. A 20. és a 21. ábra szemléltet ilyen 3D-s képet az ózonkoncentrációról egy hajnali (08 UTC, helyi idő szerint 03 óra) és egy délutáni órában (20 UTC, helyi idő szerint 15 óra).



20. ábra. Az ózon pillanatnyi koncentrációjának [ppmV] 3 D-s ábrája a hajnali órákban (2006. augusztus 1. 08 UTC-kor) a modellezett területre.



21. ábra. Az ózon pillanatnyi koncentrációjának [ppmV] 3D-s ábrája a délutáni órákban (2006. augusztus 1. 20 UTC-kor) a modellezett területre.

5.2. A SMOKE modell telepítése, a tesztfutásának eredményei

Hosszútávú célunk a CMAQ kémiai transzportmodell rendszer hazai környezetbe történő beillesztése, így fontos a rendszeres futtatáshoz szükséges input adatokat biztosító másik két modell (WRF-ARW és SMOKE) megismerése és telepítése az ELTE Atlasz szerverre. A CMAQ modellt korábban Gyöngyösi András Zénó telepítette, így számunkra az első feladat a modell számára input adatokat biztosító SMOKE emissziós modell installálása volt, amit sikeresen megtettünk a honlapon [8 – cmasceneter.org/] található használati útmutató alapján. A telepítés után a modell tesztfuttatása is megtörtént. Későbbi munkánk során (tervezett operatív futtatások) jobbnak láttuk, ha saját főkönyvtárunkba is telepítjük a CMAQ (előbbi fejezetben részletesen) és a WRF-ARW (következő fejezetben) modellt a megfelelő beállításokkal. A két modell akkor tud egymással összhangban működni, ha ugyanazokkal a beállításokkal dolgoznak.

A SMOKE modell sikeres telepítéséhez szükség volt a NetCDF valamint az I/O API könyvtárak felépítésére is. Az I/O API feladata kezelni a különböző típusú kimenő és

bemenő fájlokat, mint például kezeli a kapcsolt virtuális fájlokat, amelyet a PMV (Parallel Virtual Machine) mechanizmusa használ, hogy adatokat cseréljen a modellek között a végrehajtással egyidejűleg.

Elsőként a szükséges fájlok letöltésére volt szükség a fentebb megadott honlapról. Ezek a következők:

```
smoke_install.csh – a telepítési scriptet,  
smoke_v351.Linux2_x86_64pg.tar.gz – a forráskódot és scripteket,  
smoke_v351.nctox.MOVES.data.tar.gz – és a tesztadatokat tartalmazó fájlok.
```

A letöltés és a megfelelő könyvtárak létrehozása után megtörtént a fájlok „kicsomagolása”, majd a használati útmutatóban leírtak alapján telepítettük a modellt. Elsőként beállítottuk, melyik legyen az a könyvtár, ahol majd dolgozunk (`setenv SMK_HOME`), ahova telepítjük a SMOKE modellt. Ezután a `source smoke_install.csh` parancssorral megtörtént a modell installálása az Atlasz szerverre, eredményeként létrejöttek a SMOKE modellhez tartozó könyvtárak. Fontos, hogy a scriptek futtatása nem bash shellben, hanem tcsh módban lehetséges csak, ugyanis a SMOKE scriptek futtatását UNIX C-shell-re tervezték. Létrejöttek az `SMK_HOME` könyvtáron belül: `data`, `subsys` (adatbázis kezelő rendszer), `scripts` alkönyvtárak. A használati útmutató alapján a következő lépés a modell megfelelő beállítása, ehhez a scripteket tartalmazó könyvtárba kell belépünk (`cd $SMK_HOME/scripts`), majd a környezeti változókat beállítjuk a `source platform` parancssorral. A `SMK_HOME/subsys/smoke/assigns` könyvtárba lépünk, ahol a `source ASSIGNS.nctox.cmaq.cb05_soa.us12-nc` parancssorral beállítjuk a környezeti változókat. Ezután a `Makeall` segítségével lefordítjuk az összes `makefile`-t.

A telepítés után tesztfuttatást készítettünk, melynek lépései megtalálhatók a fentebb említett honlapon. A későbbi futtatások egyszerűbbé tételére létrehoztunk egy `futtatas_smoke.csh` nevű scriptet, amely tartalmazza a futtatás parancssorait. A script megtalálható a függelékben. A futtatás lépései:

```
setenv SMK_HOME ,  
cd $SMK_HOME/subsys/smoke/assigns ,  
source ASSIGNS.nctox.cmaq.cb05_soa.us12-nc – beállítjuk az assigns fájlt.
```

Ezután következik a kezdő év (base year) scriptjeinek futtatása, amelyek feldolgozzák az állandó területi, biogén, nem útszakaszhoz kapcsolódó mobil, és pont kibocsátásokat.

Ehhez be kell lépni a `SMK_HOME/SCRIPTS/run` könyvtárba, ahol begépeljük a következő parancssorokat:

`smk_area_nctox.csh` - futtatjuk az állandó területi scriptet,

`smk_bg_nctox.csh` - BEIS3-ből származó biogén eredetű emissziós adatokkal dolgozó script futtatása,

`smk_nonroad_nctox.csh` - a nem úthálózathoz kapcsolódó mobil emissziós adatokkal dolgozó script futtatása,

`smk_point_nctox.csh` - pontforrásból származó emissziós adatokkal dolgozó script futtatása,

`smk_rateperdistance_noRFL_nctox.csh` - úthálózaton, mozgó forrásból származó sebesség/távolság alapú emissziós adatokkal dolgozó script futtatása (minden folyamatra, kivétel a kocsik újratankolása),

`smk_rateperdistance_RFLonly_nctox.csh` - úthálózaton mozgó forrásból származó sebesség/távolság alapú emissziós adatokkal dolgozó script futtatása (amikor újratankolták a kocsit),

`smk_ratepervehicle_noRFL_nctox.csh` - úthálózattól távoli, mozgó forrásokra hivatkozó sebesség/jármű alapú script futtatása (minden folyamatra kivétel az újratankolás),

`smk_ratepervehicle_RFLonly_nctox.csh` - úthálózattól távoli mozgó mobil forrásokra hivatkozó script futtatása (újratankolás esetén),

`smk_rateperprofile_nctox.csh` - úthálózattól távoli, mozgó mobil forrásokra hivatkozó script futtatása (sebesség profil alapú),

`smk_mrgall_nctox.csh` - mindenféle forrásból származó adatokkal dolgozó script futtatása.

Futtatás után leellenőrizzük, a log fájlok tartalmazzák-e az error hibaüzeneteket (`grep ERROR *`). Később megbizonyosodunk róla valóban minden rendben ment-e (`cd $SCRIPTS/install, check_smk_install`).

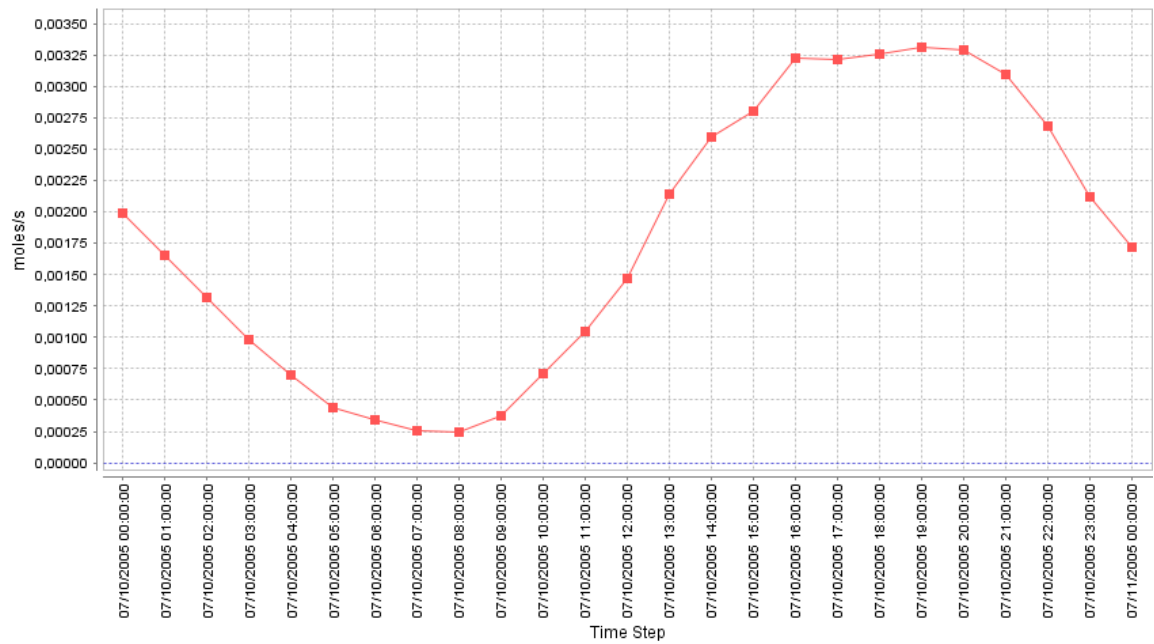
A modell tesztfuttatása 2005. július 10 00 UTC és 11-e 24 UTC közötti időszakra vonatkozik, Lambert szögterítési koordináta-rendszerben 66 x 52 rácsponton, 12 km-es horizontális rácsfelbontásra, Észak-Carolina területére, amely az EPA 12 km-es nemzetközi rácsozásának egy alterülete. A tesztfuttatást a modellcsomaghoz kapott adatok segítségével végeztük el, ellenőrizve ezzel a modell sikeres telepítését. A tesztet magába

foglalja a toxikus folyamatokat, amelyek lehetnek állandó területi, biogén, úthálózattól távol eső és pontforrásból származó kibocsátások is.

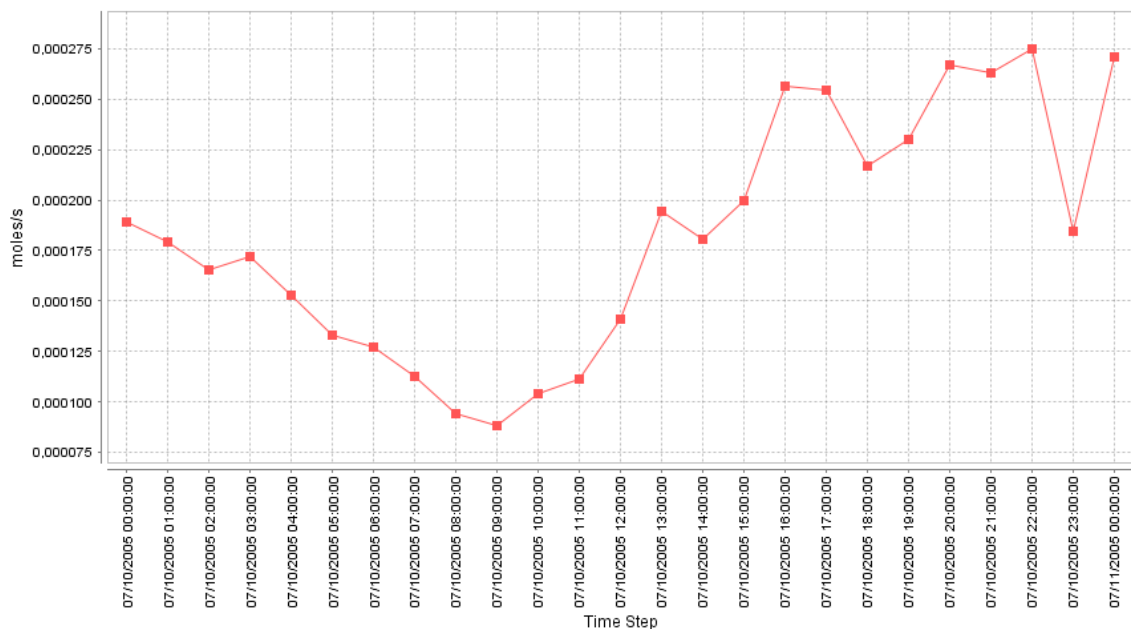
A továbbiakban bemutatok néhány emissziós eredményt a SMOKE modell tesztfuttatásának outputjai közül. Kitérek a biogén eredetű kibocsátások napi alakulására, az úthálózathoz és úthálózaton kívüli mozgó források emissziójára is, amelyeket a többféle (pont, biogén, mobil forrásból származó) output kibocsátási eredményekből kaptunk. A felhasznált input adatokat a NEI (National Emission Inventory – Nemzeti Emissziós Leltár) biztosította a SMOKE modell számára.

Az ábrák illusztrációk. Szemléltetik a SMOKE modell alkalmazhatóságát, ugyanakkor felhívják a figyelmet a bemenő adatfájlok fontosságára, a CMAQ modell számára adott felszíni mezők sokféleségére. A SMOKE modell hazai alkalmazása, az emissziós adatbázisok elkészítése már meghaladja a diplomamunka kereteit. Ez a jövő év feladata.

A 22. és a 23. ábrán az úthálózathoz kapcsolódó és az úthálózaton kívüli mozgó forrásból származó átlagos NO_2 kibocsátás [mol/s] napi menetét látjuk, ahol a kibocsátás értéke rácsnégyzetre van normálva. Mindkét ábrán jól kivehető a kora reggeli órákban történő kibocsátás növekedés, amely a beinduló járműforgalomnak köszönhető. A maximumot a délutáni órákban éri el, majd este elkezd csökkenni (járműforgalom leáll). A 22. ábrán a napi menet kevésbé „ingadozik” – jól láthatóan vagy nő, vagy csökken – míg a 23. ábrán látszik a nappali növekedés mellett is elkezd erősen csökkenni a kibocsátás mértéke.

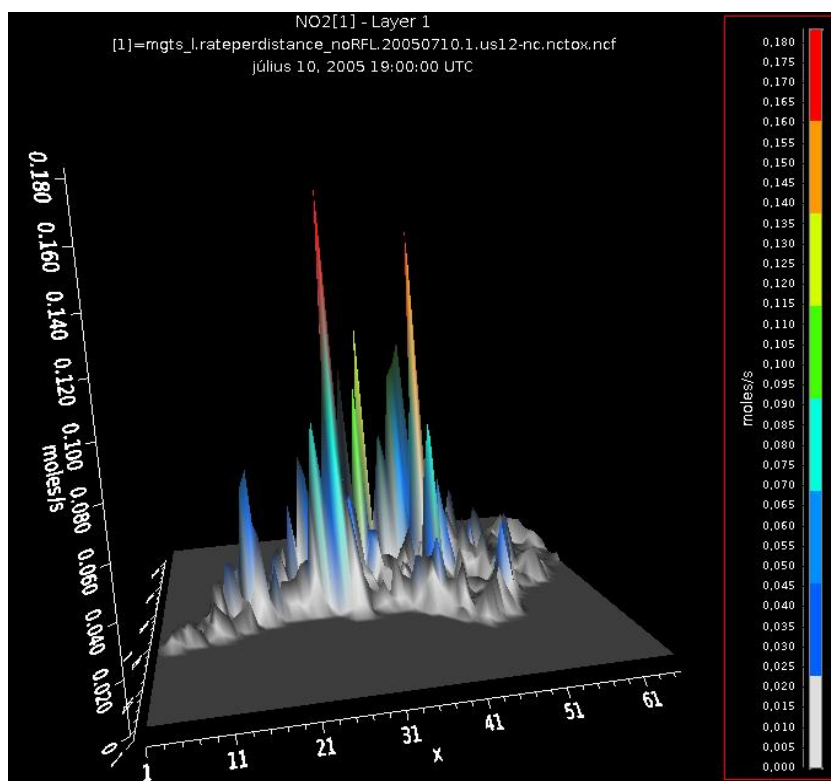


22. ábra. Úthálózathoz kapcsolódó, mozgó forrásokból származó átlagos NO₂ kibocsátás napi menete (piros vonallal jelölve) a modellezett területre mol/s mértékegységben. Az idő az x-tengelyen UTC-ben értendő. A kibocsátás értéke rácsnégyzetre normálva.



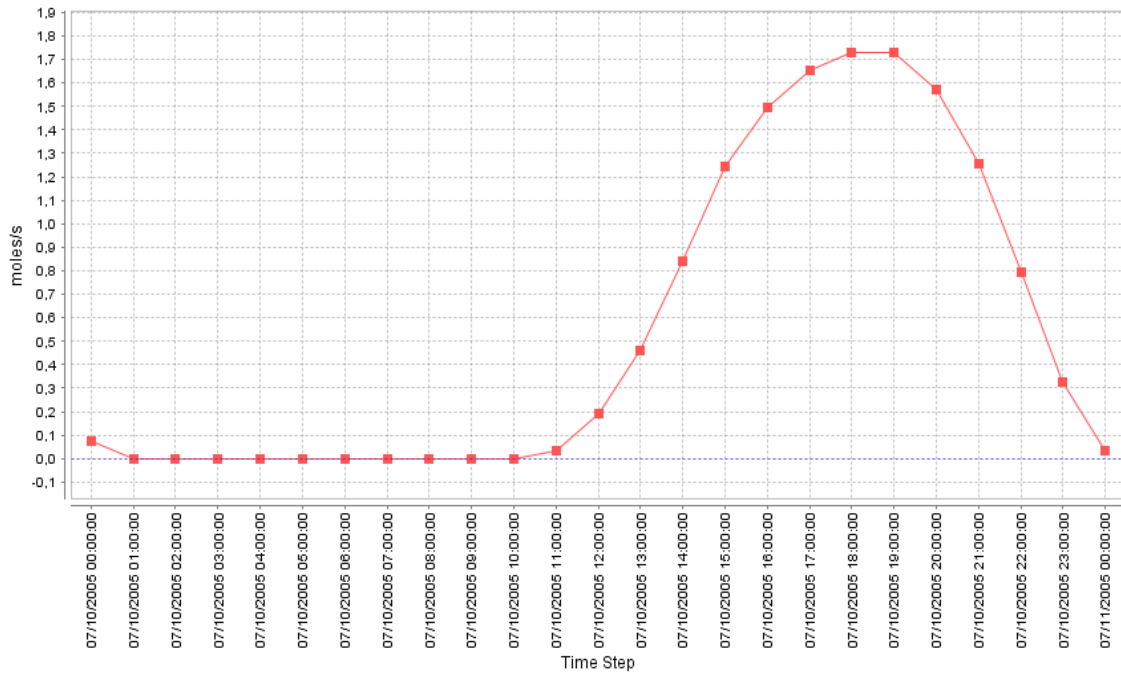
23. ábra. Úthálózaton kívüli mozgó, forrásból származó átlagos NO₂ kibocsátás napi menete (piros vonallal jelölve) a modellezett területre mol/s mértékegységben. Az idő az x-tengelyen UTC-ben értendő. A kibocsátás értéke rácsnégyzetre normálva.

A 24. ábra mutatja az úthálózathoz kapcsolódó mozgó forrásokból származó nitrogén-dioxid emisszió 3D-s képét a modellezett területre.

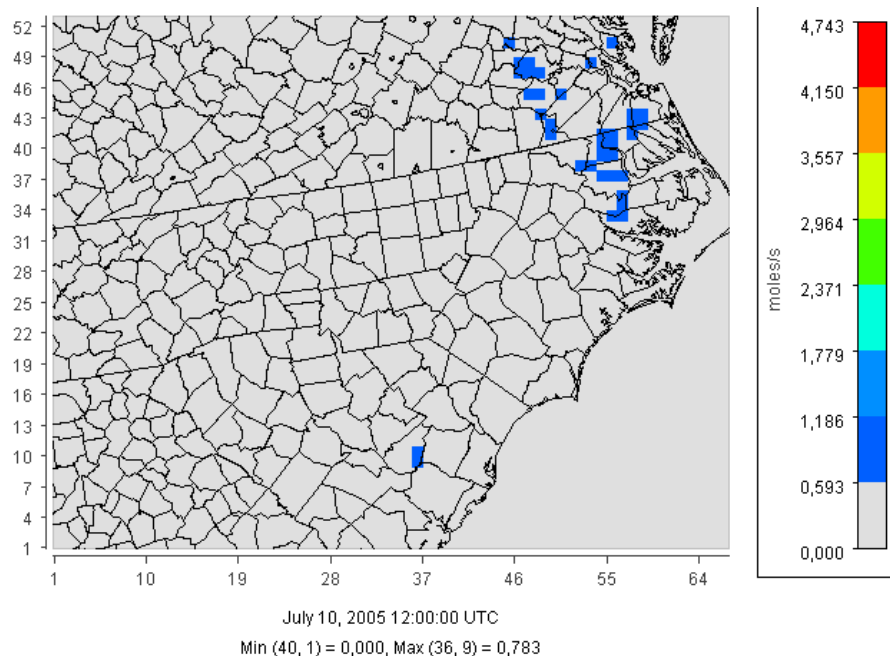


24. ábra. Az úthálózathoz kapcsolódó mozgó forrásokból származó NO₂ kibocsátás [mol/s] a modellezett területre 2005. július 10-én 19 UTC-kor, helyi idő szerint délután 2 órakor. A kibocsátás értéke rácsnégyzetre normálva.

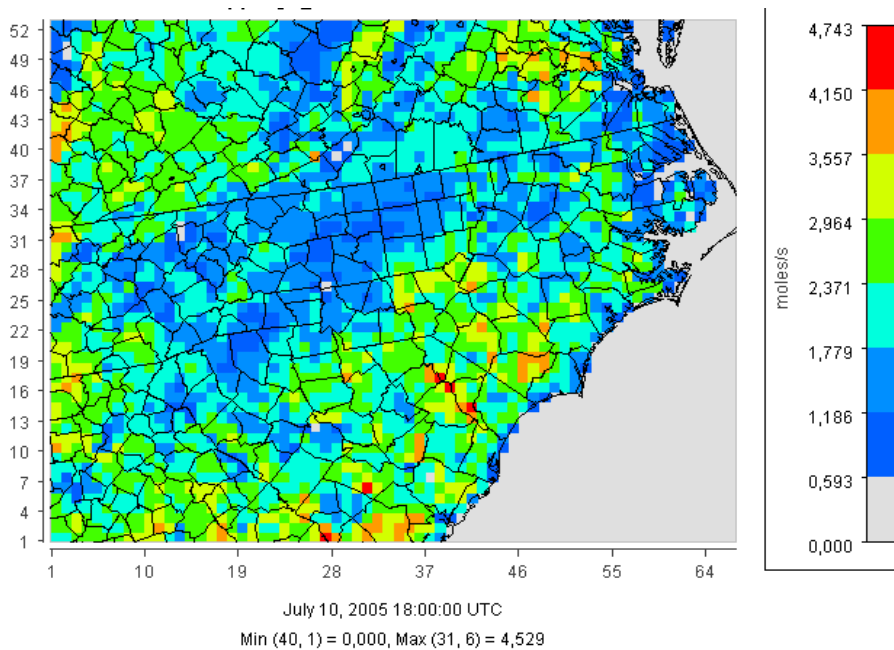
A 25. ábra az izoprén kibocsátás napi menetét szemlélteti. Az izoprén a növények által nagy mennyiségben kibocsátott szerves gáz. A kibocsátás intenzitása faj, fény és hőmérsékletfüggő (*Salma et al.*, (2012)). Ez a fény és hőmérsékletfüggés jól látható a 25. ábrán. A reggeli órákban indul el az emisszió, majd az esti órákban áll le.



25. ábra. Az átlagos izoprén emisszió [mol/s] napi menete (piros vonallal jelölve) 2005. július 10 00 UTC és 11-e 00 00 UTC között Észak-Carolina területre. A kibocsátás értéke rácsnégyzetre van normálva. Megjegyzendő, hogy az x -tengelyen az idő UTC-ben értendő.



26. ábra. Az izoprén kibocsátás [mol/s] értékei 2005. július 10-én 12 UTC-kor (helyi idő szerint reggel 7 órakor) Észak-Carolina területére. A kibocsátás értéke rácsnégyzetre van normálva.



27. ábra. Az izoprén kibocsátás [mol/s] értékei Észak-Carolina területére 2005. július 10-én 18 UTC-kor (helyi idő szerint 13 órakor). A kibocsátás értéke rácsnégyzetre van normálva.

A 26. és 27. ábra szintén a biogén forrásokból származó izoprén kibocsátást szemléleti térképes formában a modellezett területre, egy reggeli (12 UTC) és egy dél körüli (18 UTC) időpontban. A 26. ábra térképe alapján a reggeli órákban (12 UTC, helyi idő reggel 7 óra) még a kibocsátás mértéke csekély, majd a délutáni órákra a nagyobb értékű emissziós értékek is megjelennek (27. ábra, 18 UTC, helyi idő szerint 13 óra).

5.3. A WRF-ARW modell telepítése

A WRF-ARW modell telepítése is szükséges volt az ELTE Atlasz szerverére egy könyvtárban belül a CMAQ és a SMOKE modellel a későbbi operatív futtatásokhoz. A nem hidrosztatikus, numerikus előrejelző modell biztosítja a rendszer számára a meteorológiai input adatokat. A modell telepítése a WRF honlapján [11 – mmm.ucar.edu/] található felhasználói útmutató alapján történt. A modell működéséhez szükség van a WPS (előfeldolgozó rendszerre), valamint az ARWpost-ra (utófeldolgozó rendszer). Első lépésben itt is az adott honlapról letöltöttük a szükséges fájlokat (`WRFV3.3.1.TAR.gz`, `WPSV3.TAR.gz`, `WRFDAV3.4.TAR.gz`, `ARWpost_V3.tar.gz`), kicsomagoltuk őket a felhasználói útmutatóban megadott sorrend szerint (WRF, WPS, WRFDA, ARWpost) és

elkezdtek feltelepíteni a modellt. A WRF rendszerének felépítése után (./configure, ./compile em_real) létrejöttek a real.exe, a wrf.exe és az ndown.exe fájlok. Ezután következett a WPS installálása, amiután létrejöttek a geogrid.exe, ungrib.exe, és metrgib.exe fájlok, végül az ARWpost telepítése után jött létre az ARW.exe fájl. A modellt sikeresen telepítettük az Atlasz szerverre (külön ábrákat nem mutatunk).

A WRF telepítése után lehetőség nyílik a kétirányú összekapcsolására a CMAQ modellel, így egy olyan rendszert kapunk, ahol a WRF modell biztosítja a kémiai transzport modell (CCTM) számára a megfelelő meteorológiai input adatokat, ugyanakkor a CCTM is biztosítja a megfelelő kémiát a meteorológiai modell számára. A dolgozat keretein belül már nem jutott idő a WRF és a CMAQ modell kétirányú összekapcsolására, így ezt és a teljes modellező rendszer (WRF-CMAQ-SMOKE) Magyarország területére történő futtatását 2014 őszén tervezzük.

6. Összefoglalás

A szabadon hozzáférhető és fejleszthető CMAQ – többléptékű közösségi levegőminőségi – légköri terjedési modell olyan modellező rendszer, amely lehetővé teszi számos légköri szennyezőanyag, az egészségre káros összetevők (mint például az ózon) koncentrációjának előrejelzését, valamint a légköri gázok mellett az aeroszol részecskék leírását. Az input adatokat szolgáltató két modell (WRF-ARW, SMOKE) szintén szabadon hozzáférhető és a közösség által fejleszthetőek, így lehetőség nyílik a CMAQ modellező rendszerének hazai környezetbe való felépítésére, magyarországi modellfuttatások készítésére. Ebbe a folyamatba kapcsolódtam be a diplomamunkám során.

Célul tűztük ki a CMAQ modell felépítésének megismerését, a működéséhez szükséges emissziós bementi adatokat biztosító SMOKE modell megismerését és telepítését az ELTE Atlasz nagyteljesítményű számítógépére. A modell telepítése nem kis energiát és időt vett el, de sikeresen megtörtént. A későbbi operatív futtatások érdekében úgy döntöttünk, hogy a CMAQ és a WRF modellt is telepítjük a saját főkönyvtárunkba (ezeket a modelleket már Gyöngyösi András Zénó telepítette, utóbbi operatíván is fut az ELTE Meteorológiai Tanszékén). A CMAQ és a SMOKE modell sikeres telepítése majd tesztfuttatása (a modellcsomagokhoz kapott tesztadatokkal) megtörtént, a kitűzött célunkat teljesítettük.

További tervek között szerepel a CMAQ modell kétirányú összekapcsolása a WRF modellel, majd a WRF-CMAQ-SMOKE modellező rendszer Magyarország területére történő futtatása.

Érdekes volt betekintést nyerni a számomra még kevésbé ismert numerikus modellezésbe. Sok időt és energiát fektettünk a modellek telepítésébe, amely során számos új meteorológiai és informatikai ismerettel bővült tudásom. Lényegesnek tartom egy ilyen modellező rendszer hazai környezetbe való felépítését, hiszen napjainkra fontos téma lett a levegőszennyezés, főleg a légszennyező anyagok egészségre káros hatásai miatt.

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek Dr. Weidinger Tamásnak, aki segített a témaválasztásban, mindig rendelkezésemre állt, hasznos tanácsokkal látott el. Köszönettel tartozom másik témavezetőmnek is, Lázár Dórának, aki időt és energiát nem kímélve mindenben segítségemre volt, támogatott és szintén hasznos tanácsokkal látott el. Mindig fordulhattam hozzájuk problémáimmal. Köszönettel tartozom még páromnak, családomnak, és barátaimnak is a kitartásra való ösztönzésért.

A diplomamunka elkészítését támogatta az OTKA-NN109679 és az OTKA-83909 pályázat, amiért ezúton is köszönetet mondunk.

Függelék

A modellek telepítéséhez írt script, amely tartalmazza a fontosabb beállításokat:

```
source /opt/intel/Compiler/11.1/072/bin/ifortvars.sh intel64
source /opt/intel/Compiler/11.1/072/bin/iccvars.sh intel64

export ALAP=/users/ladqaat/

export CC=icc
export CXX=icpc
export CFLAGS='-O3 -xT -heap-arrays -ip -no-prec-div -static'
export CXXFLAGS='-O3 -xT -heap-arrays -ip -no-prec-div -static'
export F77=ifort
export FC=ifort
export f90=ifort
export FFLAGS='-O3 -xT -heap-arrays -ip -no-prec-div -static'
export CPP='icc -E'
export CXXCPP='icpc -E'
export CPPFLAGS=-I/users/ladqaat/include
export LDFLAGS=-L/users/ladqaat/lib
export LIBS='-L/users/ladqaat/lib/ -lnetcdf -lnetcdff -lrt -lm -lz'

export OMPI_MPICC=icc
export OMPI_MPIF77=ifort
export OMPI_FC=ifort

export
PATH=/opt/intel/Compiler/11.1/072/bin/intel64:/usr/bin:/bin:/usr/local/slurm/bin:
/users/ladqaat/bin

export JASPERLIB=${ALAP}/lib
export JASPERINC=${ALAP}/include

export NETCDF=${ALAP}
```

A felhasználói útmutató alapján a SMOKE modell futtatásához írt script:

```
#!/bin/csh

#SMOKE futtatás a telepítés után

# SMK_Home beállítása

setenv SMK_HOME /users/ladqaat/smoke/
echo 'SMK_HOME beállítás: '
pwd
#Platform és egyéb beállítások futtatása
echo 'Platform és Assigns futtatása'
cd $SMK_HOME/scripts

source platform

cd $SMK_HOME/subsys/smoke/assigns #(change to the assigns directory)

source ASSIGNS.nctox.cmaq.cb05_soa.us12-nc

#belepés a run könyvtárba és futtatni a szükséges scripteket
echo 'Futtatás kezdése'
cd $SCRIPTS/run #(change to the run scripts directory)

./smk_area_nctox.csh #(invoke the stationary area run script)
```

```

echo 'smk_area_nctox.csh vege'
./smk_bg_nctox.csh #(invoke the BEIS3 biogenic run script)
echo 'smk_bg_nctox.csh vege'
./smk_nonroad_nctox.csh #(invoke the nonroad mobile run script)
echo 'smk_nonroad_nctox.csh vege'
./smk_point_nctox.csh #(invoke the point run script)
echo 'smk_point_nctox.csh vege'
./smk_rateperdistance_noRFL_nctox.csh #(invoke the MOVES mobile sources on-
roadway rate-per-distance (RPD) run script for all processes except for refueling
mode [RFL])
echo 'smk_rateperdistance_noRFL_nctox.csh vege'
./smk_rateperdistance_RFLonly_nctox.csh #(invoke the MOVES mobile sources on-
roadway rate-per-distance (RPD) run script just for refueling mode [RFL])
echo 'smk_rateperdistance_RFLonly_nctox.csh vege'
./smk_ratepervehicle_noRFL_nctox.csh #(invoke the MOVES mobile sources off-
network rate-per-vehicle (RPV) run script for all processes except for refueling
mode [RFL])
echo 'smk_ratepervehicle_noRFL_nctox.csh vege'
./smk_ratepervehicle_RFLonly_nctox.csh #(invoke the MOVES mobile sources off-
network rate-per-vehicle (RPV) run script just for refueling mode [RFL])
echo 'smk_ratepervehicle_RFLonly_nctox.csh vege'
./smk_rateperprofile_nctox.csh #(invoke the MOVES mobile sources off-network
rate-per-profile (RPP) run script)
echo 'smk_rateperprofile_nctox.csh vege'
./smk_mrgall_nctox.csh #(invoke the all-sources merge script)
echo 'smk_mrgall_nctox.csh vege'
echo 'Futtatas vege'
cd $LOGS #(change to the log file directory for the test case)
echo 'ERROROK KIIRATASA: '
grep ERROR *

cd $SCRIPTS/install #(change to the install directory)

./check_smk_install #(invoke the smoke install quality assurance script)

```


Irodalomjegyzék

- Baklanov, A., 2010: Chemical weather forecasting: a new concept of integrated modeling, *Advances in Science and Research* 4, 23–26.
- Baklanov, A., Mahura, A. and Sokhi, R., 2010: Integrated systems of meso-meteorological and chemical transport models, Springer, 190 p., ISBN 978-3-642-13979-6, 9-10.
- Bieser, J., Aulinger, A., Matthias, V., Quante, M. and Builtjes, P., 2011: SMOKE for Europe – adaptation, modification and evaluation of a comprehensive emission model for Europe, *Geoscientific Model Development*, Vol. 4, 47.
- Borge, R., Lumberras, J. and Rodriguez, M.E. 2003: Preparation of emission data for modeling with CMAQ from Spanish Emission Inventories and emission projections, 12th International Emission Inventory Conference: „Emission Inventories – Applying New Technologies" San Diego, April 29 - May 1. 2003, 1.
- Bozó, L., Mészáros, E. és Molnár, Á., 2006: Levegőkörnyezet modellezés és megfigyelés, Akadémia Kiadó, 75., 81.,84-85., 91. 92.,127.
- Byun, D. and Schere, K.L., 2006: Review of the governing equations, computational algorithms, and other components of the Model-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 59., 53.
- Daly, A. and Zannetti, P., 2007: Air Pollution Modeling – An Overview. Chapter 2 of ambient air pollution, The Arab School for Science and Technology (ASST) and The EnviroComp Institute, 15–28.
- Dye, T.S., Chan, A.C., Anderson, C.B., Strohm, D.E., Wayland, R.A. and White, J.E., 2004: From raw air quality data to the nightly news: an overview of how EPA's AIRNow program operates, Sixth Conference on Atmospheric Chemistry: Air Quality in Megacities, 3. January, 2004, 1.
- Ihász, I., 2000: Nagytávolságú kémiai és radioaktív szennyezőanyag-terjedés modellezése az OMSz-ban az ALADIN és az ECMWF numerikus időjárás előrejelzési valamint a MEDIA diszperziós modellrendszer alkalmazásával, Országos Meteorológiai Szolgálat, Meteorológiai Tudományos Napok 2000., 119–120., 123.
- Jerrett, M., Arain, A., Kanaroglou, P., Beckerman, B., Potoglou, D., Sahuvaroglu, T., Morrisin, J. and Giovis C., 2005: A review and evaluation of intra-urban air pollution exposure models, *Journal of Exposure Analysis and Environmental Epidemiology*, 15, 192.

- Kukkonen, J., Olsson, J.T., Schultz, D.M., Baklanov, A., Klein, T., Miranda, A.I., Monteiro, A., Hirtl M., Tarvainen, V., Boy, M., Peuch, V.–H., Poupkou, A., Kioutsioukis, I., Finardi, S., Sofiev, M., Sokhi, R., Lehtinen, K.E.J., Karatzas, K., San José, R., Astitha, M., Kallos, G., Schaap, M., Reimer, E., Jakobs, H. and Eben, K., 2012: A review of operational, regional-scale, chemical weather forecasting models in Europe, *Atmospheric Chemistry Physics* 12, 1–12.
- Lagzi, I., Turányi, T., Alison, S.T. and Haszpra, L., 2009: Modeling photochemical air pollutant formation in Hungary using an adaptive grid technique, *International Journal of Environment and Pollution* 36., 44–46.
- Lee, S.-M., Fernando, H. J. S. and Grossman-Clarke, S., 2007: MM5-SMOKE-CMAQ as a modeling tool for 8-h ozone regulatory enforcement: application to the state of Arizona, *Environmental Modeling and Assessment* 12, 63.
- Leelőssy, Á., 2012: Baleseti kibocsátásból származó szennyezőanyagok lokális skálájú terjedésének modellezése, MSc diplomamunka, ELTE Meteorológiai Tanszék, Budapest (témavezetők: Dr. Mészáros Róbert, Dr. Lagzi István László), 5.
- Ling, B., 2012: Légköri szennyezőanyag terjedést leíró modellek, BSc szakdolgozat, ELTE Meteorológiai Tanszék, Budapest (témavezető: Dr. Mészáros Róbert), 5–7, 12.
- Loughner, C.P., Allen, D.J., Dickerson, R.R., Zhang, D.-L., Shou, Y.-X. and Pickering, K.E., 2009: Investigating the use of high resolution WRF-URBAN canopy model simulation with CMAQ, 8th Annual CMAS Conference, Chapel Hill, NC, October 19–21, 2009, 1–2.
- Mészáros, R., Lagzi, I., Kolozsi-Komjáthy, E., Leelőssy, Á., Steierlein, Á. és Nagy R., 2012: Légköri terjedési és ülepedési modellek fejlesztése és alkalmazása, *Légkör* 57, 162–165.
- Mészáros, R., Vincze, Cs. and Lagzi, I., 2010: Simulation of accidental release using a coupled transport (TRES) and numerical weather prediction (ALADIN) model, *Időjárás* 114., 101–102.
- Nagy, A., 2010: A WRF-modell alkalmazása mezo-gamma skálájú folyamatok modellezésére, MSc diplomamunka, ELTE Meteorológiai Tanszék, Budapest (témavezetők: Dr. Horváth Ákos, Dr. Ács Ferenc), 10–11.
- Pederzoli, A., 2008: The application of an Eulerian chemical and transport model (CMAQ) at fine scale resolution to the UK, Doctor of Philosophy The University of Edinburgh, 25.
- Radnainé Gyöngyös, Zs., 2004: Levegőtisztaságvédelem, Pécsi Tudományegyetem, 79–81.

- Salma, I., Barkács, K., Bartholy, J., Kiss Keve, T., Pongrácz, R., Reskóné Nagy, M., Sohár, P., és Tóth, B., 2012: Környezetkémia, Typotex Kiadó, 74., 90.
- Sarwar, G., Luecken, D., Yarwood, G., Whitten, G. Z. and Carter, W. P. L., 2008: Impact of an updated carbon bond mechanism on predictions from the CMAQ modeling system: preliminary assessment, *Journal of Applied Meteorology and Climatology* 47., 3-6.
- Szepesi, D., 1967: Légszennyező anyagok turbulens diffúziójának meteorológiai föltételei Magyarországon, *Országos Meteorológiai Intézet Hivatalos Kiadványai XXXII. kötet*, 8.
- Wendl, B., 2009: A WRF modell működése az ELTE Meteorológiai Tanszék számítógépes rendszerében. Szélprofil becslések. Diplomamunka, ELTE Meteorológiai Tanszék, Budapest (témavezető: Gyöngyösi András Zénó), 11–13.
- Wilczak, J.M., Djalalova, I., McKeen, S., Bianco, L., Bao, J.-W., Grell, G., Peckham, S., Mathur, R., McQueen, J. and Lee, P., 2009: Analysis of regional meteorology and surface ozone during the TexAQS II field program and an evaluation of the NMM-CMAQ and WRF-Chem air quality models, *Journal of Geophysical research*, 114., 1.
- Wong, D.C., Pleim, J., Mathur, R., Binkowski, F., Otte, T., Gilliam, R., Pouliot, G., Xiu, A., Young, J.O. and Kang, D., 2011: WRF-CMAQ two-way coupled system with aerosol feedback: software development and preliminary results, *Copernicus Publications on behalf of the European Geosciences Union*, 2417–2428.
- Yarwood, G., Rao, S., Yocke, M. and Whitten, G.Z., 2005: Updates to the Carbon Bond chemical mechanism: CB05, U.S. Environmental Protection Agency Research Triangle Park, NC 27703, 3., 7., 10–11.

Internetes források

[1 – cmascenter.org/]

[http://www.airqualitymodeling.org/cmaqwiki/index.php?title=CMAQ_version_5.0_\(February_2010_release\)_OGD](http://www.airqualitymodeling.org/cmaqwiki/index.php?title=CMAQ_version_5.0_(February_2010_release)_OGD)

[2 – eea.europa.eu/] <http://www.eea.europa.eu/themes/air/intro>

[3 – Alkalmazott számszerű előrejelzés jegyzet]

http://elte.prompt.hu/sites/default/files/tananyagok/numerikus_prognosztika/ch01s03.html

[4 – epa.gov/] http://www.epa.gov/ttn/scram/dispersion_prefrec.htm#aermod

[5 – met.hu/] <http://www.met.hu/idojaras/elorejelzes/modellek/>,

[6 – met.hu/] <http://www.met.hu/omsz/tevekenysegek/levegokornyezet/modellezes/>

[7 – met.hu/]

http://met.hu/levegokornyezet/varosi_legszennyezettseg/elorejelzes/tajekoztato/

[8 – met.hu/] http://www.met.hu/levegokornyezet/varosi_legszennyezettseg/elorejelzes/o3/

[9 – met.hu/]

http://www.met.hu/levegokornyezet/varosi_legszennyezettseg/elorejelzes/o3/grafikon/

[10– cmascenter.org/] <http://www.cmascenter.org/smoke/documentation/3.5.1/html/>

[11 – mmm.ucar.edu/] <http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/>

[12 – mmm.ucar.edu/] <http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/model.html>

[13 – cmascenter.org/] <http://www.cmascenter.org/verdi/>