

NYÁRI SZMOG-HELYZETEK ELŐREJELZÉSE ADAPTÍV RÁCSMODELLEL

Haszpra László, Lagzi István*, Turányi Tamás*, Alison Tomlin** és Radnóti Gábor

Országos Meteorológiai Szolgálat, 1675 Budapest, Pf. 39
haszpra.l@met.hu, radnoti.g@met.hu

* ELTE Fizikai Kémiai Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány P. sétány 1/A
lagzi@vuk.chem.elte.hu, turanyi@garfield.chem.elte.hu

** Department of Fuel and Energy, The University of Leeds, Leeds, LS2 9JT, UK
alison.t@chem.leeds.ac.uk

Összefoglalás – A magyarországi fotokémiai levegőszennyezésének leírására 3-dimenziós, Euler-típusú, adaptív rács-modellt fejlesztettünk ki. Ennél a modelltípustól a számítások során a rácsfelosztás térben és időben oly módon változik, hogy a véges felbontásból származó numerikus hiba minimális, a számítási sebesség, hatékonyság pedig maximális legyen. Ezzel módszerrel elérhető, hogy adott számítástechnikai kapacitás mellett a legpontosabban eredményekre jussunk. A modellt, egyebek mellett, egy 1998. augusztusi levegőszennyezési epizód adataival teszteltük. A modell pontossága és számítástechnikai igényei alapján lehetőség van arra, hogy összekötve az OMSZ korlátos tartományú numerikus előrejelző modelljével (ALADIN) operatív levegőszennyezésség előrejelzéseket szolgáltatassunk.

Bevezetés

Az 1940-es években Los Angeles környékén olyan új típusú levegőszennyezés jelent meg, amely alapvetően különbözött a téli időszakokat jellemző füstködöktől (londoni típusú szmog). Kiderült, hogy a nitrogén-oxidokkal, szén-monoxiddal és reaktív szénhidrogénekkel erősen szennyezett levegőben az intenzív napsugárzás hatására olyan fotokémiai folyamatok játszódnak le, amelyek erősen egészség- és környezetkárosító anyagok keletkezéséhez vezetnek. Kedvezőtlen meteorológiai feltételek között ezek az ún. másodlagos szennyezőanyagok a légkörben felhalmozódhatnak, és kialakulhat a fotokémiai szmognak nevezett jelenség. Az ózon és a folyamatokban keletkező egyéb fotokémiai termékek károsítják a légzőrendszert, ingerlik a szemet és a nyálkahártyát, valamint komoly károkat okoznak a természetes és mezőgazdasági növényállományban. A fotokémiai szmogot elsősorban a magas oxidáns (főleg ózon) koncentráció és az aeroszol részecskék felszaporodása miatt a derült idő ellenére tapasztalható kis látástávolság jellemzi.

A gépkocsiforgalom növekedésével a fotokémiai szmog Európában is megjelent. A helyi, városi, elsősorban a mediterrán térség nagyvárosait jellemző szmog-epizódok mellett, a forrásterületek eloszlása és a földrajzi viszonyok következtében esetenként több százezer km²-t is elborító, regionális fotokémiai szmogok is kialakulnak. Az elmúlt két évtizedben hozott intézkedések hatására a helyzet romlása megállni látszik, de a fotokémiai szmog Európa nagy részén, így Magyarországon is, egyelőre komoly egészségügyi és környezetvédelmi probléma.

A fotokémiai szmog keletkezése

Az ózonképződésben kulcsszerepet játszanak a reaktív szénhidrogének oxidációja során keletkező peroxi-gyökök. Ezek kis relatív koncentrációja esetén a belsőégésű motorokból származó nitrogén-monoxid (NO) az ózonnal lép reakcióba, és így magas ózon-koncentrációk nem alakulhatnak ki. Többnyire ez a helyzet a városok belterületén. Ha a nitrogén-monoxid koncentrációja valamilyen okból lecsökken, például a szennyezett légtömeg elhagyja a nagy NO kibocsátású területet, akkor ez az ózon-fogyasztó reakció visszaszorul, és így magas ózon-koncentrációk alakulhatnak ki. Ennek megfelelően a városkörnyéki lakosság általában nagyobb ózonerhelést kap, mint a városi. Mivel az ózonképződésben az illékony, reaktív szénhidrogénekből származó peroxi-gyököknek meghatározó szerepük van, a kialakuló maximális ózon-koncentráció erősen függ a levegőben lévő nitrogén-oxidok és illékony reaktív szénhidrogének arányától.

Az adott helyen kialakuló ózon-koncentráció számtalan tényezőtől függ: alapterheléstől (regionális háttér-koncentráció), a kibocsátott szennyezőanyagok mennyiségétől, összetételétől, a kibocsátás időbeli menetétől, a légkörben lezajló légmozgásoktól (hígulás, advekción), a napsugárzás intenzitásától és időbeli alakulásától, a hőmérséklettől, a légnedvességtől, stb. Mindez a szmogképződés folyamatát olyanmódon bonyolulttá teszi, hogy a ható tényezők egyszerű számbavételével a várható ózon-koncentráció még megközelítőleg sem becsülhető. Az ózonképződés leírására ezért matematikai modelleket kell használnunk.

Az adaptív rácsmodell

A statisztikai előrejelző modellek a korábbi mérések statisztikai elemzésén alapulnak, ezért nem képesek figyelembe venni a szennyezőanyag kibocsátás mennyiségének, összetételének és területi eloszlásának az évek során bekövetkezett változását. Az utóbbi évek gyors változásai közepette megbízható előrejelzéseket nem várhatunk tőlük. Nem alkalmasak a különböző beavatkozási stratégiák hatásának előzetes becslésére, a szmog-riadó tervek megalapozására, és kritikus helyzetben nem segíthetik a döntéshozókat.

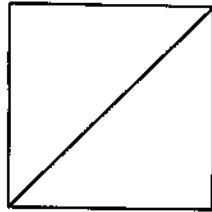
A dinamikai modellek adott kiindulási helyzetből a fizikai és kémiai folyamatok matematikai leírásán keresztül becslik a jövőben előálló ózon-koncentrációt. Előnyük, hogy képesek az időben változó folyamatokat nyomon követni, az aktuális feltételekből kiindulni, és így alkalmasak döntés előkészítési célokra. Hátrányuk, hogy a modellek fejlesztése komoly munkaráfordítást, a számítógépes programok futtatása pedig gyors, nagykapacitású számítógépeket igényel.

A dinamikai modellek a légkört egymás fölött elhelyezkedő síkokkal rétegekre bontják, egy-egy síkot pedig rácshálózattal osztanak fel. Valamennyi rácspontra, minden időlépcsőben megoldják a koncentráció-változásokat leíró csatolt parciális differenciálegyenlet-rendszert, amely figyelembe veszi a transzport, a turbulens diffúzió, a kémiai reakciók, az emisszió, valamint a száraz- és nedves ülepedés hatását:

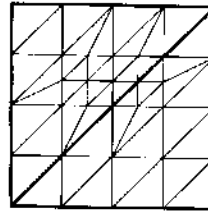
$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{\partial(u c_i)}{\partial x} - \frac{\partial(v c_i)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}(K_x \frac{\partial c_i}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K_y \frac{\partial c_i}{\partial y}) + R_i(c_1, c_2, \dots, c_n) + E_i - k_{11} c_i$$

Itt c_i az i -edik anyagfajta koncentrációja, u , v a vízszintes szélesség x és y irányú komponensei, K_x és K_y a turbulens diffúziós együtthatók, és k_{fi} a száraz ülepedési együttható. E_i az i -edik anyagfajta emisszióját leíró tag, R_i a kémiai forrástag, amely az i -edik anyagfajta reakcióit írja le. A 3-dimenziós differenciálegyenlet-rendszer megoldásának túlzott számítástechnikai igénye miatt a rétegek közötti anyagátvitelt ma még többnyire önálló algoritmusokkal adják meg.

A hagyományos dinamikus modelleknél a rácshálózat (többnyire négyzetrács) rögzített. Ez azt eredményezi, hogy a térben vagy időben gyors koncentráció-változást mutató helyeken a felbontás az elfogadható pontosságú eredményhez elégtelen lehet, míg a lassú változások régiójában/idején fölöslegesen kötjük le a számítógép kapacitásait, szükségtelenül lassítjuk az egyébként is gépidő igényes program futását. Az adaptív rácsmodelleknél a rács a véges tér- és időbeli felbontásból származó numerikus hibától függően, egy megfelelő algoritmus jóvoltából, automatikusan sűrűsödik vagy ritkul, növelve így a számítások pontosságát, miközben – szerencsés esetben – még a program futása is felgyorsul, kisebb kapacitású számítógépeken is futtathatóvá válik. A háromszögrács szükség szerinti sűrítését mutatja be az 1. ábra.



durva rácsfelosztás



többszörösen finomított rácsfelosztás

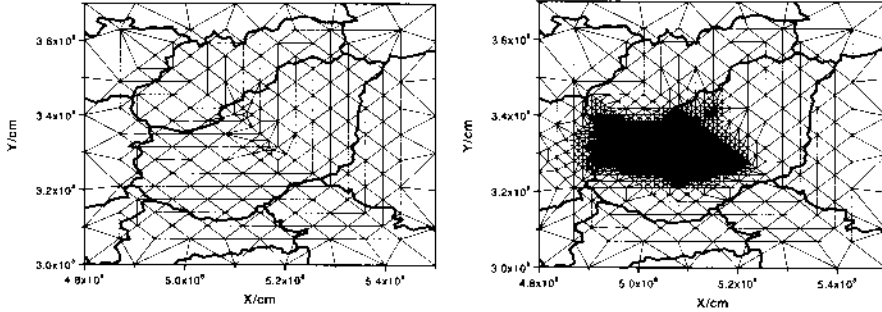
1. ábra

A rács térbeli sűrűségének változása

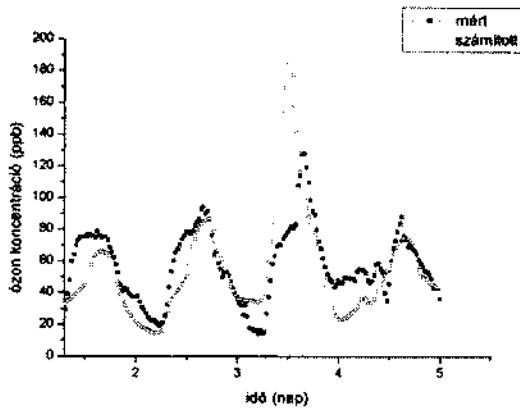
Az általunk használt modell alapváltozatát a Leeds-i Egyetemen dolgozták ki (Berzins *et al.*, 1989, 1992; Berzins, 1994; Hart, 1998). Hazai adaptációja és továbbfejlesztése az ELTE Fizikai Kémiai Tanszékén történt (Lagzi *et al.*, 2001, 2002). A bemutatott számításoknál egy egyszerű, hétlépéses, összevont kémiai reakciómechanizmust használtunk (GRS, Generic Reaction Set) (Azzi and Johnson, 1992), de tetszőleges reakciómechanizmus beépítése könnyedén megoldható. A modell működtetéséhez szükséges európai emisszió-katasztert az EMEP-től (<http://www.emep.int>), a finomabb felbontású hazai katasztereket pedig a Környezetvédelmi Intézettől és a Fővárosi Önkormányzattól kaptuk. A meteorológiai adatokat az Országos Meteorológia Szolgálat korlátos tartományú numerikus előrejelzési modelljéből nyertük (Horányi *et al.*, 1996), de nagyobb térségek folyamatainak modellezéséhez igénybe vettük az ECMWF adatbázisát is.

Teszt számítások

A modellt részletesen teszteltük. A számítások közül az 1998. augusztus elejére vonatkozó eredményeket mutatjuk be, amikor egész Közép-Európában napokig magas ózon-koncentrációkat mértek. A 2. ábra az alkalmazott rácsnak a kiindulási és egy nappali időszakra vonatkozó szerkezetét mutatja be. A 3. ábrán a K-pusztai állomáson mért és az erre a helyre számított ózon koncentrációk jó egyezése látható.



2. ábra
A rács szerkezete kezdetben és a 4. nap közepén



3. ábra
A K-pusztai állomáson mért és számított ózon koncentráció változása 1998. augusztus 2-5. között

A 4. és 5. ábrákon (l. a IX. színes tablón) az ózon területi eloszlásának két jellegzetes mintája látható. A 4. ábra az augusztus 2. 16 órai helyzetet mutatja. Délután a szél dél-keleti irányú volt, aminek következtében magas ózon-koncentráció a Budapeستől szélirányban 30-50 kilométerre fekvő területeket sújtotta. Másnap (5. ábra) az igen gyenge szél miatt a főváros körül egy „ózon gyűrű” alakult ki, ami dél-keleti

irányban megnyúlt. Megfigyelhető, hogy Budapest belső területein az ózon koncentrációja mindkét esetben kisebb, mint a főváros környékén, ami a jelentős városi nitrogén-monoxid kibocsátás következménye. A számításoknál térben homogén kezdeti koncentrációkat tételeztünk fel. Ha a modell helyes, a számított koncentrációk nem teljesen pontos kezdeti koncentrációk esetén is, bizonyos átmeneti időszak után, a reális értékekhez közelítenek.

Következtetések

A teszt-számítások bebizonyították, hogy a modell alkalmas az ózonképződés megfelelő pontosságú leírására, és így felhasználható hatástanulmányokhoz, illetve előrejelzési célokra. Ugyancsak felhasználható szmog-riadó tervek, illetve környezetvédelmi intézkedések megalapozásához. Számítástechnikai kapacitás-igénye nem lépi túl a rendelkezésre álló lehetőségeket, ami lehetővé teszi operatív ózon-koncentráció előrejelzések készítését. Ez utóbbi érdekében célunk, hogy a közeljövőben a modellt az Országos Meteorológiai Szolgálat korlátos tartományú numerikus időjárás-előrejelzési modelljével (ALADIN) közvetlen adatkapcsolatba hozzuk. Ilyen módon nem sokkal az időjárás-előrejelzés elkészülte után rendelkezésre fog állni a levegőtisztaság előrejelzése is.

Köszönetnyilvánítás

A szerzők ezúton is köszönetet mondanak Martin Berzinsnek (The University of Leeds) a numerikus módszerek kidolgozásáért, Kutas Józsefnek (Környezetvédelmi Intézet) és Óri Istvánnak (Főpolgármesteri Hivatal) az emissziós adatokért, továbbá Horányi Andrásnak (Országos Meteorológiai Szolgálat) a meteorológiai adatokhoz való hozzáférés elősegítéséért. A fejlesztési munkát támogatta az Országos Tudományos Kutatási Alap (T025875) és a magyar-brit kétoldalú T&T együttműködés (50/98).

Irodalom

- Azzi, M. and Johnson, G. M., 1992: *Proc. 11th Clean Air Conf. 4th Regional IUAPPA Conf., Brisbane*
- Berzins, M., 1994: Temporal Error Control in the Method of Lines for Convection Dominated PDEs. *SIAM J. Sci. Comp.* 16, 558-580
- Berzins, M., Dew, P. M. and Furzeland, R. M., 1989: Developing software for time-dependent problems using the method of lines and differential algebraic integrators. *Appl. Numer. Math.*, 5375-390
- Berzins, M., Lawson, J. and Ware, J., 1992: Spatial and Temporal Error Control in the Adaptive Solution of Systems of Conservation Laws. *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations*, IMACS VII, 60-66
- Hart, G., Tomlin, A., Smith, J. and Berzins, M., 1998: Multi-scale atmospheric dispersion modelling by use of adaptive gridding techniques. *Environmental Monitoring and Assessment* 52, 225-238
- Horányi, A., Ihász, I. and Radnóti, G., 1996: ARPEGE/ALADIN: A numerical Weather prediction model for Central-Europe with the participation of the Hungarian Meteorological Service. *Időjárás* 100, 277-301
- Lagzi, I., Tomlin, A. S., Turányi, T., Haszpra, L., Mészáros, R. and Berzins, M., 2001: The simulation of photochemical smog episodes in Hungary and Central Europe using adaptive gridding models. *Lecture Notes in Comp. Sci.*, 2074, 67-77
- Lagzi, I., Tomlin, A. S., Turányi, T., Haszpra, L., Mészáros, R. and Berzins, M., 2002: Modelling photochemical air pollution in Hungary using an adaptive grid model. In: *Air Pollution Modelling and Simulation*, Springer, Berlin, 264-273