

dr. Jure RAVNIK
prof. dr. Matjaž HRIBERŠEK
dr. Matej ZADRAVEC

Primerjava modelov razširjanja onesnaževal v ozračju

Comparison of air pollution dispersion models



Z naraščajočo računsko močjo postajajo numerične simulacije vedno bolj dosegljive. Simulacije dogajanj v atmosferi so danes že mogoče, vendar pa temeljijo na prenekaterih predpostavkah in poenostavitvah. Nekatere izmed teh so bile uvedene že v prejšnjem stoletju, zato je danes čas, da razmišljamo o njihovi omilitvi. Napovedovanje razširjanja onesnaževal tradicionalno poteka preko poenostavljenih modelov, ki na podlagi meteoroloških parametrov po ozračju prenašajo Gaussove porazdelitve koncentracij. V članku enako nalogo zaupamo modelu, ki temelji na računalniški dinamiki tekočin. Rezultate analiziramo in določimo prednosti in slabosti obeh pristopov.

Numerical simulations are with the ever growing computing power becoming more and more accessible. Simulation of conditions in atmosphere is already possible today, although they do base on some assumptions and simplifications. Some of them were introduced in the previous century; therefore today it is time to rethink these assumptions and limitations. Prediction of pollutant concentrations in the atmosphere is traditionally performed using simplified models, which, based on meteorological data, move Gaussian distributions of pollutant concentrations. In this paper we employed a computational fluid dynamics model for the same task. Results are analysed and advantages and disadvantages of both models are discussed.

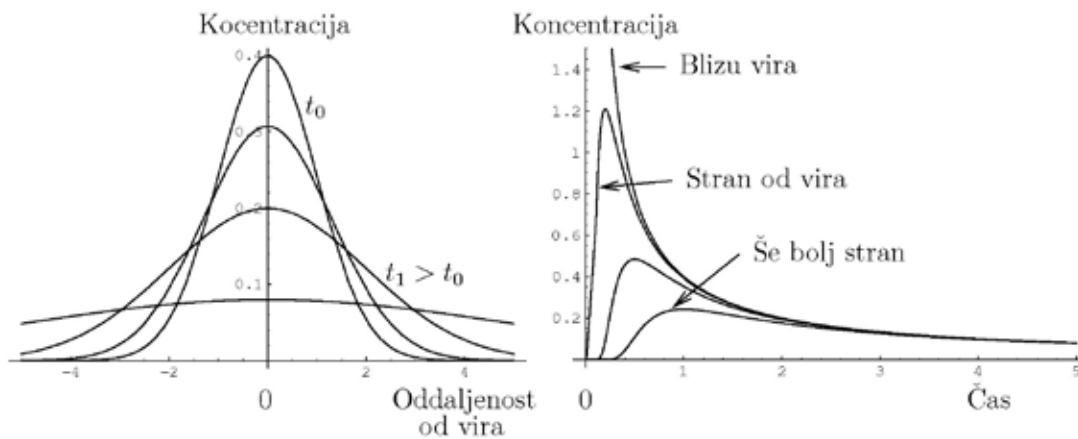
Danes predstavljajo numerični modeli jedro modernih inženirskih simulacijskih orodij. V uporabi so tako kompleksni modeli, ki vključujejo fiziko mehanike tekočin, prenosa snovi, mase in toplote na zelo podrobnem, diferencialnem nivoju, kot tudi poenostavljeni modeli, ki delujejo na podlagi mnogih poenostavitev in predpostavk z uporabo preprostih rešitev za prenos snovi in toplote. Kadar imamo opravka z razširjanjem onesnaževal v okolju, je to praviloma vedno povezano z gibanjem tekočine, zraka ali vode. Rezultati kompleksnih modelov za opis gibanja onesnaževal v tekočini, ki jih označujemo s skupnim imenom Računalniška dinamika tekočin (RDT, angl.: Computational Fluid Dynamics, CFD), so natančne časovno in krajevno

no odvisne porazdelitve zračnega tlaka, hitrosti vetra in koncentracij onesnaževal. Zaradi navadno velikega območja, kjer je razširjanje onesnaževal potrebno simulirati in zaradi dolgih časov razširjanja, je uporaba modelov računalniške dinamike tekočin omejena z računsko močjo računalnika. Poenostavljeni modeli te omejitve nimajo, saj je njihova računska zahtevnost veliko manjša in jih preprosto uporabljamo na običajnem osebnem računalniku, časi računanja pa se merijo v minutah oz. nekaj urah. Na drugi strani modeli računalniške dinamike tekočin zahtevajo paralelno izvajanje na gručah osebnih računalnikov oziroma na vektorskih superračunalnikih.

Primerjali smo dva modela. Iz nabora kompleksnejših modelov računalniške dinamike tekočin smo uporabili ANSYS-CFX (Ansys 2009), med poenostavljenimi pa Gaussov disperzijski model ISC-ISCST3 (EPA, 1995, 1995, Lakes Environmental 2006). Zanimala nas je predvsem uporabnost posameznih modelov za napovedovanje koncentracij onesnaževal v atmosferi, njune prednosti in slabosti. V nadaljevanju podajamo matematično fizikalne osnove obeh modelov in primerjavo rezultatov na primeru razširjanja trdnih delcev v atmosferi.

Modeli računalniške dinamike tekočin

Prenos snovi, mase in tok tekočin v naravi sledi trem osnovnim zakonom ohranitve. Ti povedo, da se masa, gibalna količina in energija ohranjajo. Modeli obenem upoštevajo, da se snov in toplota prenašata z difuzijo in konvekcijo. Difuzijski prenos snovi je določen z difuzivnostjo, npr. onesnaževala v zraku, difuzijski prenos toplote pa s toplotno prevodnostjo. Konvektivni prenos poteka s samim tokom tekočine, ki s seboj odnaša snov in toploto. Zakoni ohranitve in difuzijsko-konvektivni transportni model za gibalno količino, snov in toploto so v matematični fiziki zapisani v obliki parcialnih diferencialnih enačb. Rešitev le-teh so porazdelitve tlaka, hitrosti zraka, koncentracije snovi in temperatur v celotnem območju reševanja. Do rešitve pridemo s pomočjo metod numerične matematike, v primeru računalniške dinamike tekočin je to navadno metoda končnih volumnov. Simulacijo lahko zaženemo, ko določimo območje reševanja in začetne ter robne pogoje. Pri izbiri območja je potrebno biti previden, da zajamemo dovolj veliko območje da ni prevelikega vpliva robov na simulacijo. Hkrati pa težimo k čim manjšemu območju,



Slika 1; Grafa prikazujeta koncentracijo onesnaževala, ki se razširja od točkastega vira samo z difuzijo. Na levi vidimo razširjanje oblaka onesnaževala, na desni pa časovni razvoj koncentracije na različnih oddaljenostih od vira.

saj lahko tako zmanjšamo računsko zahtevnost. Če je problem simetričen, lahko simetrijo izkoristimo in simuliramo samo pol območja. Zelo pomembna je tudi določitev robnih pogojev. Iz meteoroloških meritev je potrebno izluščiti višinski hitrostni profil vetra, ki ga predpišemo na robu območja. Vir onesnaženja postavimo v ustrezno točko modela in pomenimo, kakšno je onesnaževalo in kolikšna količina se sprošča v določeni smeri. Ko simulacija steče, se onesnaževalo razširja z difuzijo in konvekcijo in model za vsak časovni korak napove trenutno koncentracijo v celotnem območju.

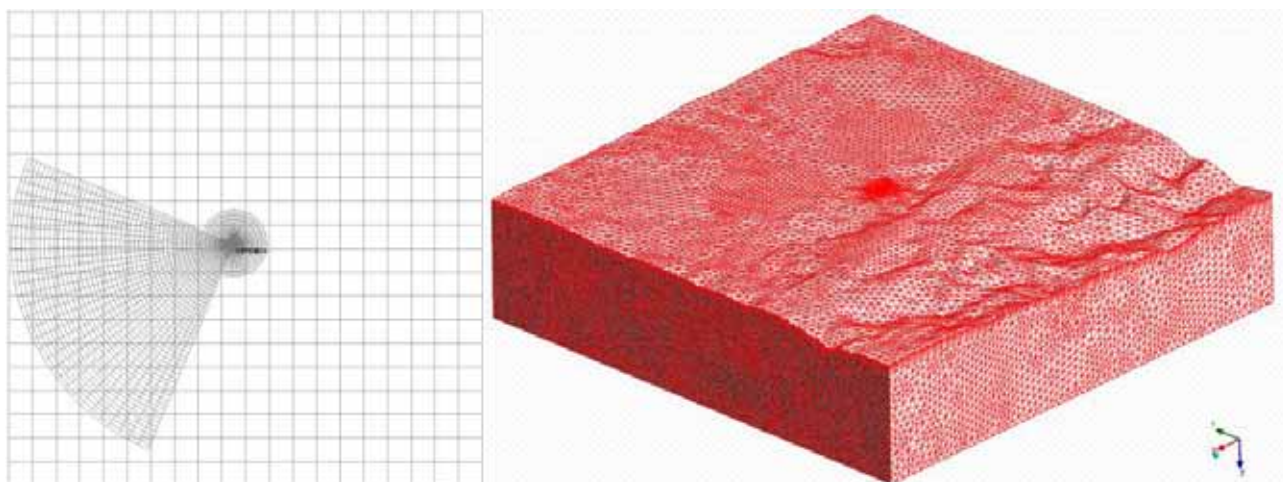
Modeli računalniške dinamike tekočin ločijo dva opisa onesnaževala: Eulejevega in Lagrangevega. Pri Eulerjevem pristopu onesnaževalo (ne glede na to, da so to na primer trdni delci) opišemo kot zvezno fazo, ki ji določimo difuzivnost. Onesnaževalo zavzema del prostornine, drugi del pa tekočina (zrak v primeru razširjanja po atmosferi ali voda v primeru razširjanja na primer nafte po morju). Lagrangev pristop obravnava onesnaževalo kot delce, navadno v obliki majhnih togih kroglic. Ker je delcev onesnaževala veliko, bi bilo računsko prezahtevno modelirati tok tekočine okoli vsakega delca. Delci onesnaževala so navadno majhni in ker potujejo bolj ali manj z vetrom in je njihova relativna hitrost glede na hitrost vetra majhna, lahko izračun sile tekočine na delec poenostavimo. Enačbe gibanja tekočine so v takih primerih analitično rešljive. Takrat je tok okoli delca stacionaren, dinamičnega vzgona ni. Sila na kroglo deluje v smeri relativne hitrosti krogle glede na tekočino. Imenujemo jo sila upora. Prvi jo je leta 1851 izračunal George Stokes. Če delci onesnaževala niso podobni krogli, lahko upor nanje popravimo s polempiričnimi nastavki, ki so podprti z meritvami. V računalniški dinamiki tekočin zvezno fazo, ki je v našem primeru zrak, modeliramo po Eulerjevem pristopu.

Omeniti velja še obravnavo turbulentnih tokov. Opis turbulence je pomemben, ker znatno vpliva na difuzijo onesnaževala. Večina inženirski praksi uporabljenih modelov rešuje časovno povprečne

enačbe in opisuje turbulenco s pomočjo modeliranja. Šele v zadnjem času prihajamo z razvojem računalništva do možnosti simuliranja turbulentnega gibanja, a le v manjših dimenzijah (npr.: tok v cevi), ki so premajhne za okoljske aplikacije.

Gaussovi modeli

Podobno kot uporabimo Lagrangevem modelu analitično rešitev toka okoli krogle za izračun sile na delec, uporabimo v Gaussovih modelih analitično rešitev za difuzijski prenos snovi in s tem se izognemo reševanju zapletenih enačb prenosa, na katerih temelji računalniška dinamika tekočin. Predstavljamo si točkovni vir onesnaženja - na primer razlitje nafte v morje. Za trenutek si mislimo, da morje miruje - brez morskih tokov in valov ni. V trenutku razlitja bo vsa nafta zbrana na enem mestu. Zaradi naključnega gibanja molekul se bo razširila v morje, pri čemer se bo koncentracija v točki razlitja zmanjševala, naftni oblak pa se bo sčasoma širil v morje. Ta proces imenujemo difuzija. Problem je analitično rešljiv. Koncentracijo v času in kraju opiše t. i. Gaussova porazdelitvena krivulja (slika 1), bralcu najbrž bolj znana kot normalna porazdelitev iz statistike. V Gaussovi krivulji nastopa parameter, navadno označen z grško črko sigma, ki pove širino oblaka onesnaževala, v katerem je 68 % mase onesnaževala. Širino roba onesnaženja pa navadno definiramo z dva sigma. V tem območju je 95 % vsega onesnaženja. Parameter sigma narašča sorazmerno s korenem iz časa. Če je tako oblak onesnaženja širok 100 m po eni uri, bo štiri ure kasneje dvakrat širši. Takšno analitično rešitev, povedano poenostavljeno, Gaussovi modeli premikajo po zraku ali morju s hitrostjo vetra oziroma morskimi tokovi ob upoštevanju posredanja zaradi gravitacije. Modeli so navadno nadgrajeni z upoštevanjem dodatnih meteoroloških parametrov, kot so temperatura, relativna vlažnost, tlak, sončno obsevanje ipd. V modelu igrajo vlogo na integralnem nivoju, kjer analitično rešitev idealiziranega problema približajo razmeram v naravi. Vključitev parametrov je



Slika 2; Na levi prikazujemo mrežo računskih točk na kateri Gaussov model izračunava koncentracijsko polje. Mreža je zgoščena okoli vira onesnaženja in v smeri dominantne hitrosti vetra. Na desni je 3D-mreža modela računalniške dinamike tekočin, ki zajema enako veliko področje. Na njej izračunavamo hitrostno, tlačno in koncentracijsko polje. Prikazana je od spodaj navzgor, da se vidi model reliefa. Velikost 10 x 10 x 3 km.

izvedena polempirično in ne na nivoju simulacije prenosa mase in toplote, kot je to v navadi pri modelih računalniške dinamike tekočin. Poleg meteoroloških parametrov, ki jih lahko brez težav izmerimo, potrebujejo Gaussovi modeli še dodatne podatke, ki se nanašajo na območje modeliranja. Navadno je mogoče vnesti digitalni model višin, pa tudi več empiričnih podatkov, ki povedo, ali je območje urbano ali ruralno, kako je poraščeno, kakšen je albedo in kakšen toplotni tok povzročajo naselja. Te podatke je težje meriti in se zato navadno ocenijo s pomočjo literature.

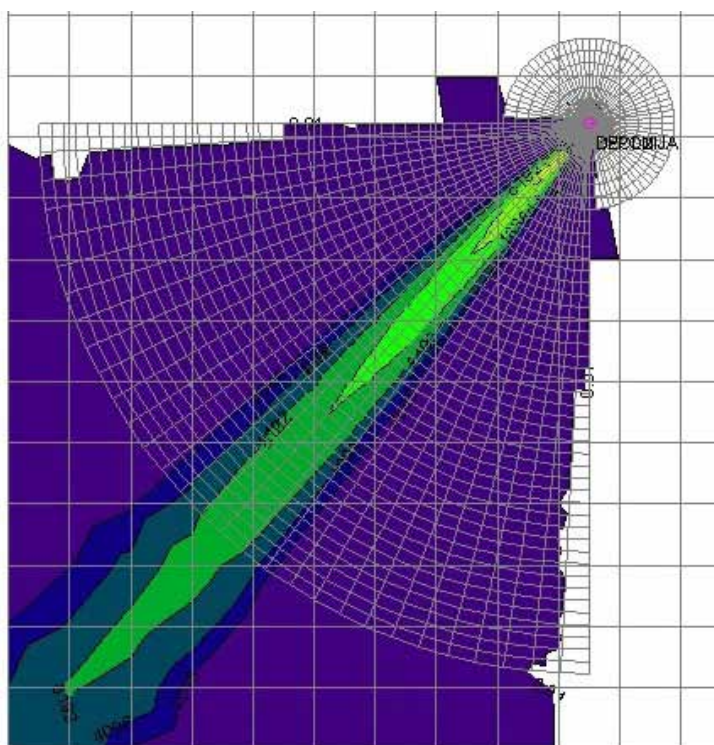
Primerjava med modeli

Cilj izvedbe simulacij je, podobno kot pri izvedbi eksperimentov, s čim višjo stopnjo zaupanja določiti parametre, ki nas zanimajo. V primeru razširjanja onesnaževal gre navadno za koncentracije oziroma količine odloženega onesnaževala, ki jih lahko pričakujemo ob takšnih ali drugačnih pogojih v naravi. Navadno so najbolj zanimive najslabše vrednosti, ki nam povedo zgornjo mejo koncentracije onesnaževala v okolju.

Prva pomembna razlika med modeli je v vhodnih podatkih. Gaussovi modeli zahtevajo več let meteoroloških parametrov, merjenih vsako uro. Z njimi se za vsako uro posebej izračunajo koncentracije onesnaževal v okolici vira ob upoštevanju Gaussove porazdelitve in meteoroloških podatkov. Računski časi so majhni, rezultate za več let urnih koncentracijskih polj dobimo le v nekaj urah. Rezultat simulacije so zgolj koncentracije. Po drugi strani zagon modela računalniške dinamike tekočin zahteva mnogo več računskega časa. Zato je potrebno med zbranimi meteorološkimi podatki vnaprej izbrati povprečne oziroma najslabše in simulacijo izvesti samo zanje. Rezultat je tridimenzionalna napoved koncentracij, tlakov in hitrosti v celotnem območju.

Računska mreža točk, na kateri se simulacija izvaja, je v primeru Gaussovega modela dvo-dimenzionalna pahljača točk. Pri računalniški dinamiki tekočin pa uporabljamo mrežo sestavljeno iz tridimenzionalnih elementov (tetraedrov, piramid, prizem), ki omogoča tri-dimenzionalno razločitev tokovnih, tlačnih in koncentracijskih polj. Na sliki 2 sta prikazani obe mreži. Slika nazorno prikazuje, da je število neznank, ki jih računamo, znatno višje pri modelih računalniške dinamike tekočin. V prikazanem primeru je razmerje v številu neznank enako približno 1 : 1000.

Kvantitativno primerjavo med modeloma smo izvedli na naslednji način. Na 10 x 10 km velikem območju z realno topografijo reliefa smo modelirala-



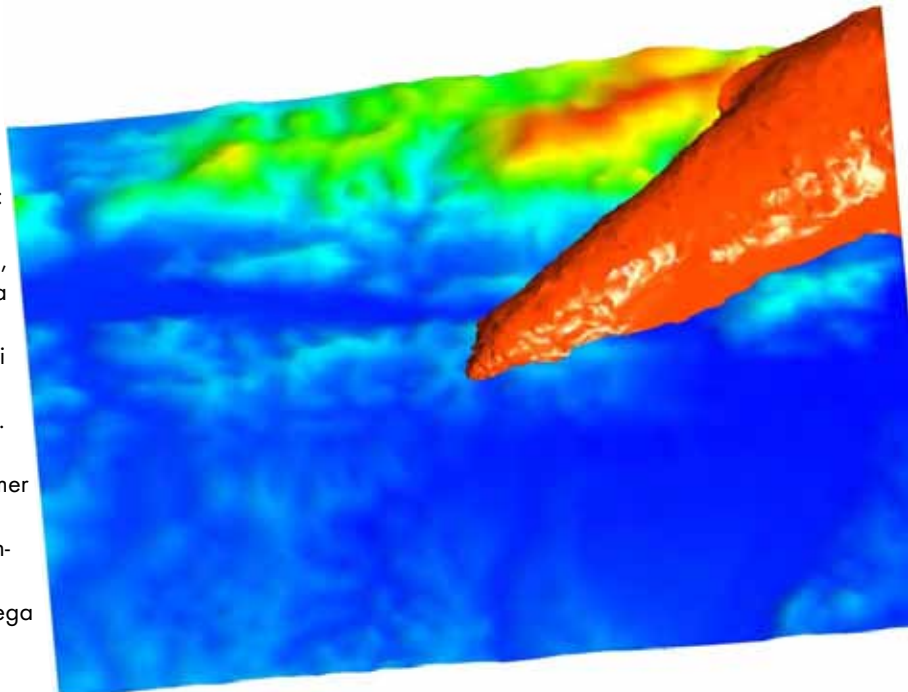
Slika 3; Slika prikazuje izolinije koncentracije, izračunane z Gaussovim modelom, ko je bila v meteorološke podatke vnesena dominantna smer vetra. Sever je zgoraj.

li razširjanje trdnih delcev gostote 2.21 g/cm^3 . Velikosti delcev so bile med 5 in 320 mikrometrov porazdeljene po naslednjih masnih deležih: 38.7 % $5 \mu\text{m}$, 16.5 % $10 \mu\text{m}$, 7.5 % $25 \mu\text{m}$, 6.6 % $35 \mu\text{m}$, 3.8 % $45 \mu\text{m}$, 6 % $60 \mu\text{m}$, 5.8 % $85 \mu\text{m}$, 9.6 % $150 \mu\text{m}$ in 5.5 % $320 \mu\text{m}$. Vir onesnaženja je bil odprti kop velikosti 250 m^2 iz katerega je v zrak uhajalo 0.0021 g/s/m^2 . Zbrali smo za tri leta urnih meteoroloških podatkov. Na podlagi rože vetrov smo določili dominantne smeri vetra. Da bi lahko modela direktno primerjali, smo v obeh primerih predpisali enako, dominantno, smer vetra. Predpostavili smo torej, da je dominanten veter pihal ves čas skozi vsa tri leta. Izolinije koncentracij Gaussovega modela so prikazane na sliki 3, izopovršina enakih koncentracij Eulerjevega RDT-modela pa na sliki 4.

Rezultati kažejo, da se onesnaževalo razširja v dominantni smeri vetra v vseh modelih. Gaussov model in Eulerjev RDT model sta prikazala znatno večje koncentracije izven dominantne smeri od Lagrangevega RDT modela, kar nakazuje na delovanje empiričnih nastavkov v modelu, ki poskrbijo za difuzijo. Model, ki temelji na podlagi računalniške dinamike tekočin, je podal tridimenzionalno porazdelitev koncentracij (slika 4). Izračunane koncentracije so v dominantni smeri pri vseh modelih enakega reda velikosti, kar je glede na popolnoma različno matematično fizikalno zasnovano modelov zadovoljivo. Glavna prednost Gaussovega modela je zmožnost hitrega preračunavanja koncentracijskih polj za različne atmosferske pogoje. Tako na podlagi dolgoletnega niza meteoroloških opazovanj zagotovo pridemo do najslabših možnih situacij, ko pride na določeni oddaljenosti od vira do najvišje možne koncentracije. V tem pogledu model RDT zaostaja, saj podaja rezultat samo za eno ali morda največ nekaj konfiguracij vhodnih parametrov. Hkrati rezultati zaradi velike razsežnosti simuliranega območja in omejitve z gostoto računske mreže tudi niso tako podrobni, kot bi si želeli. Po drugi strani pa model RDT boljše upošteva model reliefa, saj veter resnično piha preko terena. Tako je mogoče ugotoviti lokalna področja, kjer se zaradi vetrovnih razmer in vpliva razgibanosti terena lahko pojavijo področja večjega odlaganja delcev. Omogoča tudi modeliranje stavb v bližini vira, ki bi lahko vidno vplivale na tok, kar je še posebej pomembno v primeru razširjanja onesnaževal v mestih.

Zaključki

Predstavljen primerjava med Gaussovimi disperzijskimi modeli in modeli računalniške dinamike tekočin za simulacijo razširjanja onesnaževal v atmosferi je razkrila prednosti in slabosti obeh pristopov. Gaussovi modeli zelo hitro napovedo koncentracijska polja na velikem območju za veliko število kombinacij meteoroloških parametrov in s tem omogočijo dobro oceno najvišje pričakovane koncentracije na določenem mestu. Modeli na



Slika 4; Slika prikazuje izopovršino enakih koncentracij onesnaževala, izračunano z Eulerjevim RDT-modelom. Prikazan je tudi digitalni model višin; sever je spodaj. Vidimo, da oblika oblaka sledi dominantni smeri z razširjanjem v prečnih smereh. Vrh koncentracije je približno 500 m nad tlemi.

podlagi računalniške dinamike tekočin so računsko mnogo bolj zahtevni in jih je mogoče uporabiti za preračunavanje le nekaj vhodnih konfiguracij. Rezultati, ki jih dobimo, so veliko bolj podrobni, saj je tok zraka in onesnaževala resnično simuliran. V trenutnem stanju razvoja cenovno dostopnih računalniških zmogljivosti služijo kot dopolnilo k rezultatom Gaussovega modela za podroben vpogled v dogajanje ob izbranih meteoroloških pogojih.

Literatura

- Ansys-CFX v12, Ansys, Inc., 2009.
- ISC-AERMOD View, Interface for the U.S. EPA ISC and AERMOD Models, Lakes Environmental, 2006.
- U. S. Environmental Protection Agency. User's guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Models - Volume 1 (Revised). EPA-454/B-95-003a. Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, NC, 1995.
- U. S. Environmental Protection Agency. User's guide for the Industrial Source Complex (ISC3) Dispersion Models - Volume II - Description of model algorithms. EPA-454/B-95-003b. Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, NC, 1995.