

**SVEUČILIŠTE U RIJECI
TEHNIČKI FAKULTET**

DARIJE DRAGIČEVIĆ

**SIMULACIJA KONCENTRACIJE
OZONA U OKOLICI
RIJEKE**

DIPLOMSKI RAD

Rijeka, 2002. god.

**SVEUČILIŠTE U RIJECI
TEHNIČKI FAKULTET**

ZAVOD ZA TEHNIČKU MEHANIKU I

RAČUNARSKO INŽENJERSTVO

Računarska dinamika fluida

DARIJE DRAGIČEVIĆ

Matični broj : 93100018

**SIMULACIJA KONCENTRACIJE
OZONA U OKOLICI
RIJEKE**

DIPLOMSKI RAD

Rijeka, 27. rujan 2002. god.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 1
		Listova : 83

SADRŽAJ

1	PREDGOVOR	2
2	UVOD	2
3	METEOROLOGIJA.....	2
3.1	TERRAIN PROGRAM	2
3.1.1	Ulazni podaci za TERRAIN	2
3.2	REGRID.....	2
3.3	INTERPF	2
3.3.1	Izračun tlaka na površini.....	2
3.3.2	Vertikalna hidrostatska interpolacija	2
3.4	MM5 PROGRAM.....	2
3.4.1	Opće jednadžbe MM5 programa	2
4	UAM-V	2
4.1	PREGLED PROGRAMA.....	2
4.2	POVIJEST RAZVOJA MODELA	2
4.3	ULAZNI PODACI POTREBNI ZA SIMULACIJU SA UAM-V PROGRAMOM	2
4.3.1	Visine slojeva i tlak.....	2
4.3.2	Vrsta tla i površinski albedo	2
4.3.3	Teren	2
4.3.4	Komponente vjetra.....	2
4.3.5	Vertikalni koeficijenti	2
4.3.6	Temperatura	2
4.3.7	Vodena para	2
4.3.8	Početne koncentracije	2
4.3.9	Rubne koncentracije.....	2
4.3.10	Područni izvori emisija	2
4.3.11	Podignuti točkasti izvori emisije	2
4.3.12	Parametri kemijskih reakcija.....	2
4.3.13	Vrtložnost i stupac ozona.....	2
4.4	IZLAZ MODEL.....	2
4.5	MATEMATIČKA FORMULACIJA.....	2
4.6	ATMOSFERSKE KEMIJSKE REAKCIJE	2
4.6.1	Kemija plinske faze.....	2
4.6.2	Prijenos zagađivača.....	2
4.6.3	Smještaj (gniježđenje) mreža	2
4.6.4	Procesi površinskog uklanjanja.....	2
4.6.5	Mikrometeorološki podmodul	2
4.6.6	Varijacije u upotrebi zemlje na podmrežnom nivou.....	2
4.6.7	Učinci vodom izazvanog stresa na otpor stoma.....	2
4.6.8	Taloženje u vodene površine	2

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 2
		Listova : 83

4.6.9	Učinci površinske vlage	2
4.6.10	Mokro taloženje	2
4.6.11	Obrađivanje uspona perjanice iz dimnjaka	2
4.7	PODMREŽNO OBRAĐIVANJE PERJANICE IZ TOČKASTIH IZVORA	2
5	PRIPREMA PODATAKA	2
5.1	POSTUPAK MODELIRANJA U MM5-U	2
5.2	GRAFIČKI PRIKAZ DOBIVENIH PODATAKA IZ PROGRAMA MM5	2
5.3	PRIPREMANJE ULAZNIH PODATAKA ZA PROGRAM UAM-V	2
5.3.1	Podaci o vjetru	2
5.3.2	Temperatura	2
5.3.3	Vlažnost zraka	2
5.3.4	Koeficijenti vertikalne difuzije	2
5.3.5	Obrada meteoroloških podataka	2
5.3.6	Ulazni podaci emisija	2
5.3.7	Rubni uvjeti	2
6	REZULTATI SIMULACIJE	2
7	ZAKLJUČAK	2
8	LITERATURA	2
9	PRILOZI	2

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 3
		Listova : 83

1 PREDGOVOR

Iznimno mi je važno spomenuti kako sam za vrijeme rad na diplomskoj radnji naišao na veliku potporu i razumjevanje osoba u mojoj okolini, koji su me bodrili i davali čvrstu potporu u privođenju ovog diplomskog kraju. Zahvalio bi se prof. dr. sc. Zoranu Mrši, mome mentoru, koji je bio prisutan u svim fazama nastanka diplomskog rada. Također bi se zahvalio gospodinu Zoranu Čariji, dipl. ing. koji mi je bio uvijek spreman pomoći kad sam to trebao.

Posebno bi se zahvalio mojoj djevojci i obitelji koji su bili uz mene od početka mog studija.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	4
		Listova :	83

2 UVOD

Ozon je plin koji se formira u atmosferi kada se tri atoma kisika spoje (O_3). Ozon se ne emitira direktno u zrak ali na razini zemlje se stvara kemijskim reakcijama spojeva NO_x -a i VOC-a (lakohlapljivih organski spojevi) uz prisutnost sunčevog zračenja. Ozon ima istu kemijsku strukturu u stratosferi (gdje je «dobar», štiti nas od štetnog UVb sunčevog zračenja) i troposferi u sloju bližem zemlji gdje je štetan. Ozon u troposferi je sastavni dio smoga u urbanim područjima. Efluenti iz motornih vozila, industrije, ishlapljivanje benzina i ostalih kemijskih otopina su jedni od glavnih izvora NO_x -a i lakohlapljivih organskih spojeva (VOC) koji su prethodnici nastanka ozona. Jako sunčano zračenje i toplo vrijeme pogoduju stvaranju vrlo visoke koncentracije ozona u nižim slojevima troposfere. Urbana područja imaju višu razinu ozona, ali i druga područja su isto pod utjecajem ozona jer vjetar nosi NO_x spojeve stotinjak kilometara od samog izvora. Koncentracija ozona može varirati iz godine u godinu. Koncentracija ozona u zraku ne može se dugoročno predvidjeti, zato jer ovisi o puno faktora kao što su: meteorološki uvjeti (posebno broj toplih i sunčanih dana), periodi bez cirkulacije zraka (vjetra). Česta izloženost visokim koncentracijama ozona može izazvati trajna oštećenja pluća, čak i kad je ozon prisutan u minimalnim koncentracijama inhalacijom izaziva razne zdravstvene probleme (bolove u grudnom košu, kašalj, iritaciju grla, mučninu i gušenje). Navedeni simptomi uslijed dužeg izlaganja ozonu mogu preći u ozbiljne probleme kao što su bronhitis, srčane bolesti, astmu, upalu pluća i smanjenje kapaciteta pluća. Ozon u nižim slojevima također oštećuje vegetaciju (oštećuje lišće drveća i drugih biljaka), uništava krajolike gradova, nacionalne parkove, mora, riječne tokove i drugo.

U slijedećim poglavljima biti će predstavljeni programi korišteni u izradi ovog diplomskog rada «Simulacija koncentracije ozona u okolini Rijeke» i sam postupak dobivanja rezultata odnosno 72-satnog scenarija koncentracije ozona u Rijeci i njejoj okolini.

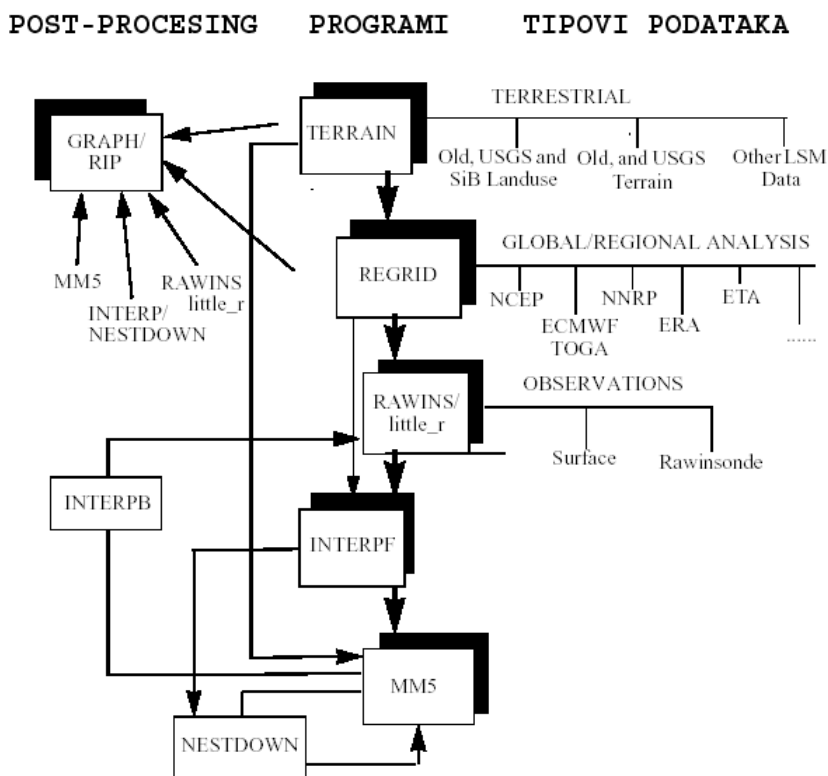
ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	5
		Listova :	83

3 METEOROLOGIJA

Na samom početku rada na diplomskom radu došao sam do problema kako pripremiti meteorološke podatke za simulaciju u programu UAM-V. Odlučio sam se na NCAR / Penn State Mesoscale Model-a (MM5) . Program je slobodan za daljnje korištenje (*free software*). Može ga se slobodno snimiti sa slijedeće web stranice: <http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mm5-home.html>.

Peta generacija NCAR / Penn State Mesoscale Model-a (MM5) je zadnja verzija u seriji programa (programskih paketa) za izradu meteoroloških matematičkih modela.

Program MM5 sastoji se od više pod-programa odnosno pred i post procesorskih programa kao što se vidi iz slike 1.

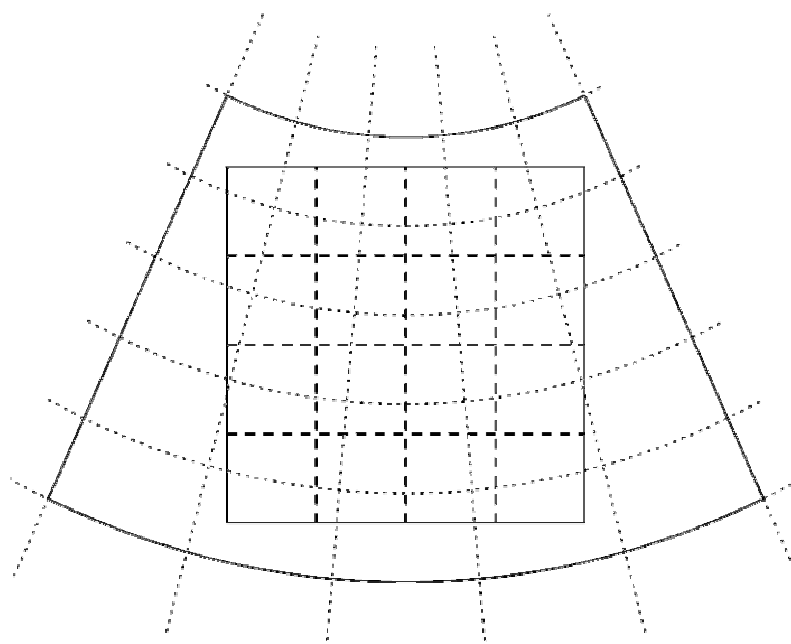


Slika 1. Dijagram toka modeliranja u MM5 programu

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 6
		Listova : 83

3.1 **TERRAIN PROGRAM**

Program koji je početak simulacije meteorološke prognoze u MM5 programskom paketu je TERRAIN. Ovaj program horizontalno interpolira odnosno analizira regularnu geografsku dužinu i širinu, elevaciju i vegetaciju na izabranom području (mesoscale domain).



Slika 2. Domena u mreži

Program TERRAIN sastoji se od četiri djela:

- ulazni podaci (source data input-a)
- interpolacije iz lat/long koordinata u mesocale mrežu
- prilagođavanja ugniježdene mreže i feed back-a
- izlazni podaci (elevacija terena, vegetacije, ...) i osatlog potrebnog za računanje meteorološke simulacije.

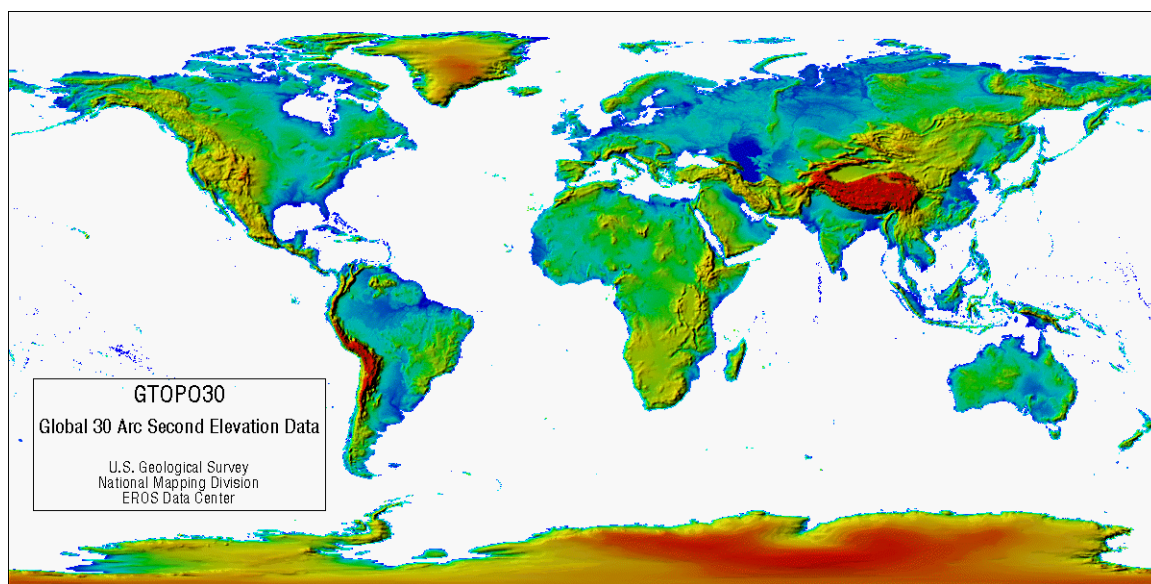
ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 7
		Listova : 83

3.1.1 Ulazni podaci za TERRAIN

Ulazni podaci sastoje se od elevacije terena, vegetacije, temperatura. Svi podaci su dostupni u šest različitih rezolucija (1 stupanj, 30, 10, 5 i 2 minute i 30 sekunda).

Postoje tri tipa vegetacije/land-use podataka:

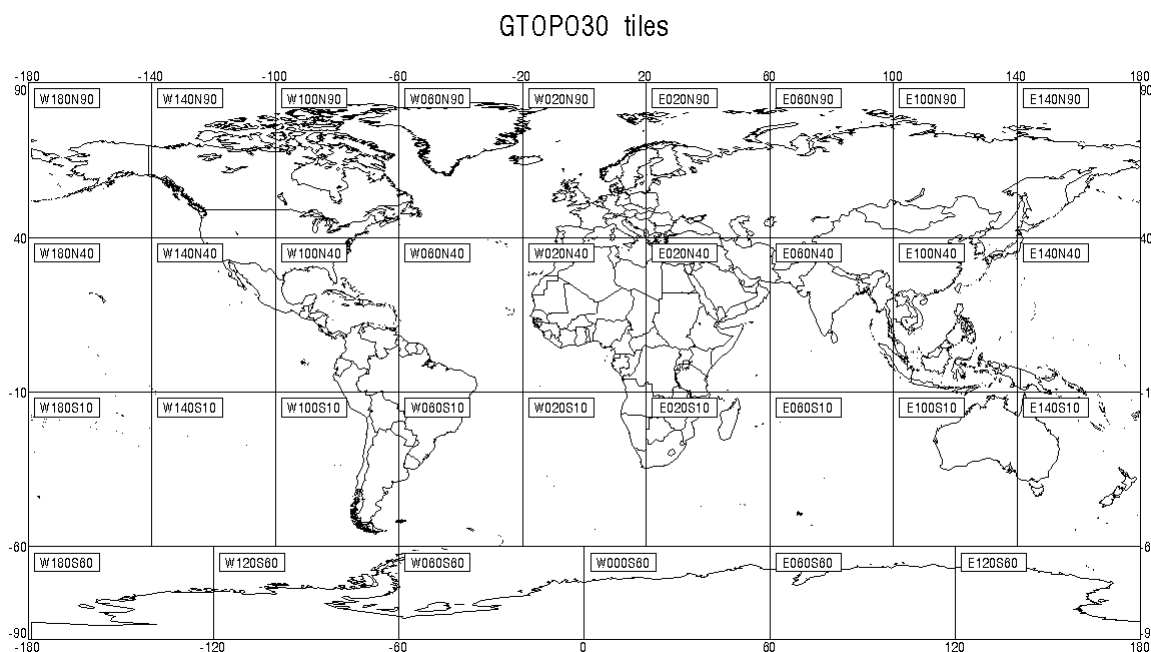
- 13 kategorija, globalno pokriveno sa rezolucijom od 1 stupnja, 30 i 10 minuta
- 17 kategorija, Sjeveran Amerika pokrivena sa rezolucijom od 1 stupnja, 30, 10, 5, 2 minute i 30 sekundi podaci
- 25 kategorija, globalno pokriveno sa svim rezolucijama (podaci se nalaze u 6 datoteka USGS)



Slika 3. GTPO30 karta

GTPO30 je globalni digitalni elevacijski model (digital elevation model – DEM) sa horizontalnom mrežom razmaka 30 sekundi (raster cca. 1 kilometar). GTPO30 je nastao iz više raznih rasterskih i vektorskih izvora topografskih informacija. Zbog lakše distribucije GTPO30 je podjeljen na više «manjih» područja kao što se vidi na mapi ispod (Slika 4).

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 8
		Listova : 83



Slika 4. GTOPO30 domene

Područje koje je bilo potrebno meni za izradu mog meteorološkog modela našao sam na <http://edcdaac.usgs.gov/gtopo30/w020n90.html>.

3.2 REGRID

Program *REGRID* čita arhivirane podatke meteorološke analize i prognoze tlakova po nivoima (level), interpolira ih iz osnovne mreže na horizontalnu mrežu definiranu u MM5 pre-procesor programu *TERRAIN*.

REGRID rješava nivoe tlaka i površinsku analizu. Ova dvodimenzionalna interpolacija je izvedena na tlakovnim nivoima.

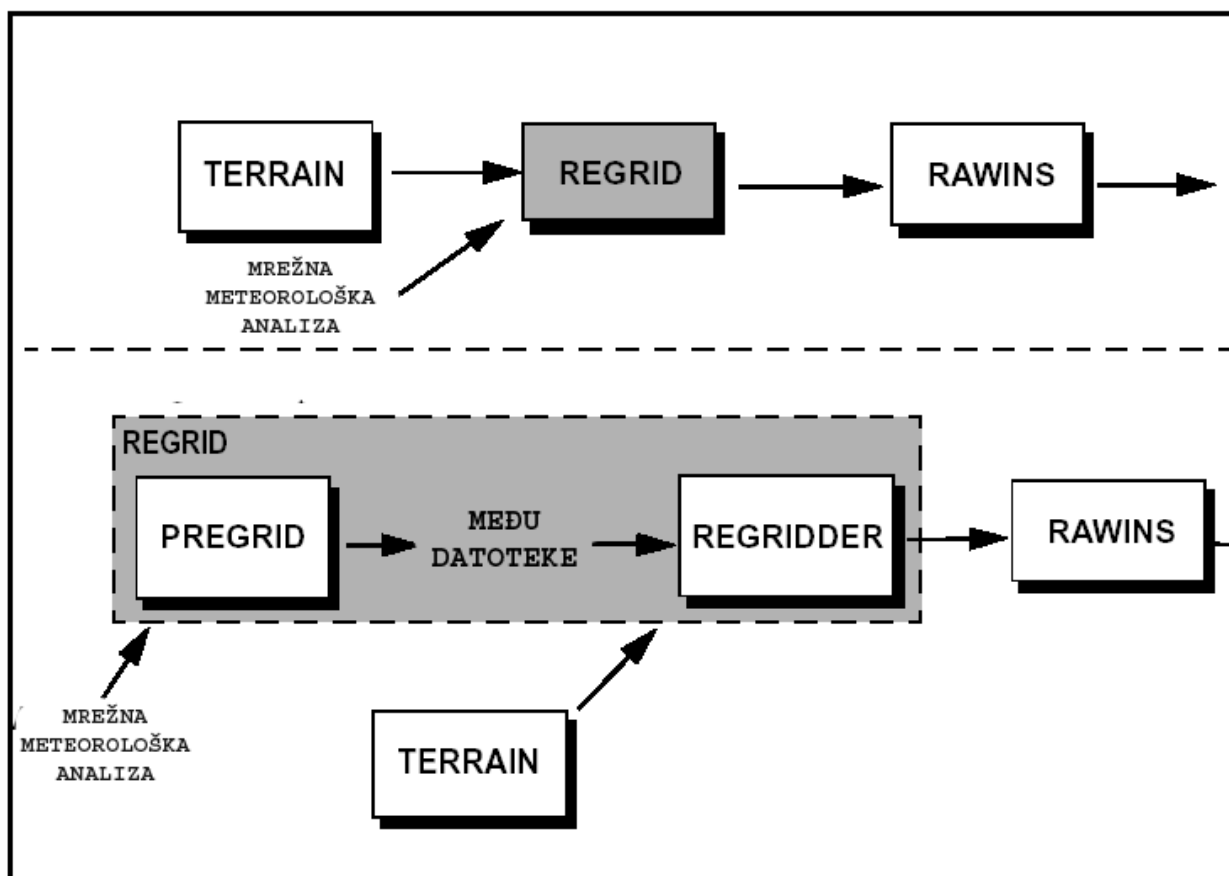
REGRID nije jedan program nego se sastoji od više podprograma koji rješavaju razne zadatke. Zadatak je podjeljen u dva glavna dijela:

- a) priprema ulaznih podataka

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	9
		Listova :	83

b) interpolacija za MM5 mrežu

Prvi dio rješava podprogram *pregrid*, a interpolacija se obavlja unutar programa *regirdder* (Slika 5.).



Slika 5. Shema REGRID programa

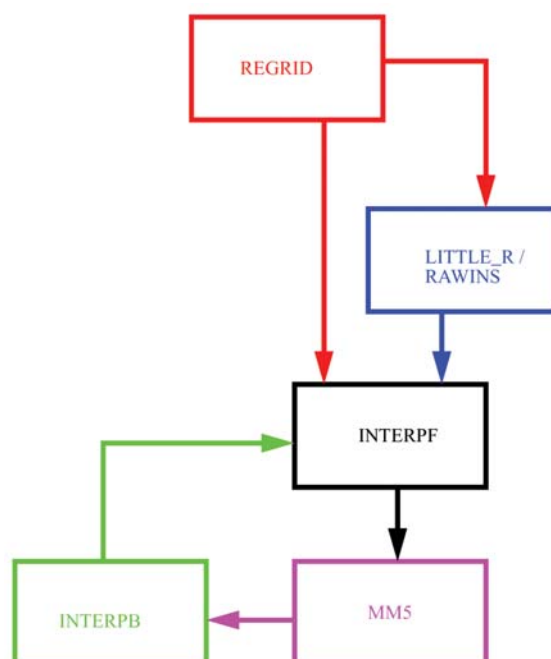
Program *pregrid* očekuje da nađe mrežnu meteorološku analizu. Vrlo veliki problem je bio naći odgovarajuću datoteku koju bi mogao iskoristiti. Prigrider može čitati veliki broj datoteka sa mrežnom meteorološkom analizom, ali 99% podataka se plaća. Tako da sam izgubio dosta vremena na pronalaženju podataka koji su slobodni za upotrebu. Podaci inače mogli bi biti lako dostupni da je naše Sveučilište član NCAR - UCAR organizacije (*National Center for Atmospheric Research*). Na njihovim serverima

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	10
		Listova :	83

moгуće je pronaći najsvježije podatke za željeno područje (stare nekoliko sati) i moguće koristiti njihova računala za izračunavanje meteoroloških simulacija.

Regridder koristi izlazne datoteke iz programa *pregrid* u kojima se nalaze podaci o temperaturi, tlakovima, horizontalnim komponentama vjetrova, relativnoj vlažnosti zraka, visine i tlakovi na tim visinama, tlak na površini mora, pokrivenost snijegom i mnogi drugi podaci.

3.3 INTERPF



Slika 6. Dijagram toka INTERPF programa

Program se bavi transformacijom podataka kod prijenosa mrežnih meteoroloških analiza sve do *mesoscal* modela, koji zahtjeva vertikalnu interpolaciju, dijagnostičko računanje i reformatiranje podataka. INTERPF kao ulaznu datoteku prihvaća izlazne

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 11
		Listova : 83

datoteke iz REGRID, RAWINS, LITTLE_R ili INTERPB programa, a na izlazu program generira inicijalne lateralne rubne uvijete i niže granične uvijete.

3.3.1 Izračun tlaka na površini

- pretpostavaka T, p na 100hPa iznad površine

$$P_{sfc} = P_{slv} \left(\frac{P_{slv}}{850} \right)^{\frac{-TER}{H_{850}}}$$

- ekstrapolirani T_{slv}

$$T_{slv} = T_{100} - up \left(\frac{P_{slv}}{P_{100} - up} \right)^{\gamma}$$

$$\gamma = \frac{\ln \frac{T_{850}}{T_{700}}}{\ln \frac{850}{700}}, \quad 700 \leq P_{100-up} \leq 850$$

- stvarni T_{sfc}

$$T_{sfc} = T_{slv} - \gamma_s \cdot TER$$

- stvarni tlak na površini

$$P_{sfc} = P_{slv} \cdot e^{\left\{ \frac{-TER \cdot g}{R} \right\} \left[\frac{1}{2} (T_{sfc} + T_{slv}) \right]}$$

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	12
		Listova :	83

3.3.2 Vertikalna hidrostatska interpolacija

Interpolacija se odvija od nivoa tlaka do σ kordinata potrebnih za interpolaciju. Kako su σ kordinate određene sa maksimumom i minimumom tlaka ekstraploacija nije potrebna.

Hidrostatski tlak je definiran sa:

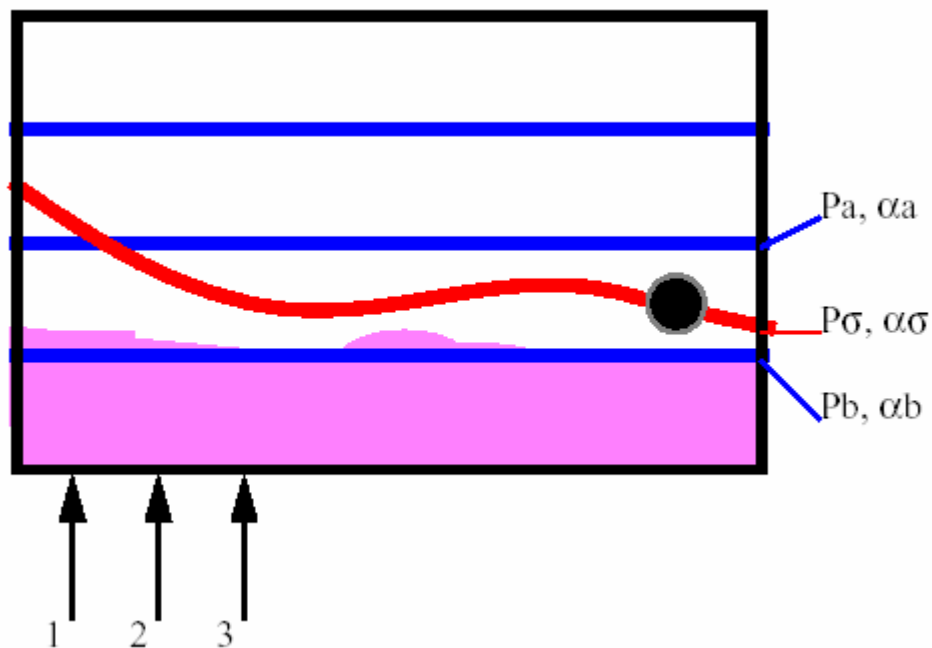
$$p_{ijk}^* = \sigma_k \cdot p_{ij}^* + p_{top}$$

gdje je:

$\sigma - 1$ d vertikalna koordinata, $\sigma=1$ je na zemlji, a $\sigma=0$ na vrhu modela

p^* - je aritmetička razlika 2D polja tlaka na površini i konstantnog tlaka p_{top}

$$\alpha_\sigma = \frac{\alpha_{P_A}(P_B - P_\sigma) + \alpha_{P_B}(P_\sigma - P_A)}{P_B - P_A}$$



Slika 7. Vertikalni profil σ površina kroz nekoliko isobarnih nivoa

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 13
		Listova : 83

3.4 MM5 program

Ovo je numerički dio sistema za modeliranje prognoze vremena. MM5 se može koristiti za široki spektar teoretskih i stvaranih (real time) studija, uključujući aplikaciju prognoziranih simulacija i četverodimenzionalnu data asimilaciju monsuna, tornada i ciklona. Na manjim meso-beta i meso-gama skalama (od 2 do 200 km), MM5 može se koristiti za istraživanje mesoscale konvektivnih sistema, fronti, vjetrova na moru, planinsko – dolinskih cirkulacija i ostalog.

3.4.1 Opće jednadžbe MM5 programa

Tlak

$$\frac{\partial p'}{\partial t} - \rho_0 \cdot g \cdot w + \gamma \cdot p \nabla \cdot V = -V \cdot \nabla p' + \frac{\gamma \cdot p}{T} \cdot \left(\frac{\dot{Q}}{c_p} + \frac{T_0}{\theta_0} \cdot D_\theta \right)$$

Moement (x – komponenta)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{m}{\rho} \left(\frac{\partial p'}{\partial x} - \frac{\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} \right) = -V \cdot \nabla u + v \left(f + u \frac{\partial m}{\partial y} - v \frac{\partial m}{\partial x} \right) - ew \cos \alpha - \frac{uw}{r_{zemlje}} + D_u$$

Moement (y – komponenta)

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{m}{\rho} \left(\frac{\partial p'}{\partial y} - \frac{\sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} \right) = -V \cdot \nabla v + u \left(f + u \frac{\partial m}{\partial y} - v \frac{\partial m}{\partial x} \right) - ew \sin \alpha - \frac{vw}{r_{zemlje}} + D_v$$

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 14
		Listova : 83

Moment (z – komponenta)

$$\frac{\partial w}{\partial t} - \frac{\rho_0}{\rho} \frac{g}{p^*} \frac{\partial p'}{\partial \sigma} + \frac{g \cdot p'}{\gamma \cdot p} = -V \cdot \nabla w + g \frac{p_0}{p} \frac{T'}{T_0} - \frac{g R_d}{c_p} \frac{p'}{p} + e(u \cos \alpha - v \sin \alpha) + \frac{u^2 + v^2}{r_{zemlje}} + D_w$$

Termodinamika

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -V \cdot \nabla T + \frac{1}{\rho \cdot c_p} \left(\frac{\partial p'}{\partial t} + V \cdot \nabla p' - \rho_0 g w \right) + \frac{\dot{Q}}{c_p} + \frac{T_0}{\theta_0} D_\theta$$

Advekcijski uvjeti

$$V \cdot \nabla A = mu \frac{\partial A}{\partial x} + mv \frac{\partial A}{\partial y} + \sigma \frac{\partial A}{\partial \sigma}$$

gdje je

$$\dot{\sigma} = -\frac{\rho_0 g}{p^*} w - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} u - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} v$$

Divergencijski uvjeti

$$\nabla \cdot V = m^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u}{m} \right) - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial \sigma} + m^2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{v}{m} \right) - \frac{m \sigma}{p^*} \frac{\partial p^*}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial \sigma} - \frac{\rho_0 g}{p^*} \frac{\partial w}{\partial \sigma}$$

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	15
		Listova :	83

4 UAM-V

Systems Applications International, Inc. (SAI) već dvadeset godina razvija i održava URABN AIRSHED MODEL (UAM-V) program. Korijeni tog programa sežu u rane sedamdesete otkada datiraju najraniji pokušaji fotokemijskog modeliranja kvalitete zraka. Model se od onda stalno primjenjuje, vrednuje, modernizira, proširuje i nadograđuje. UAM-V sistem promjenjive mreže (*variable-grid*) je najsuvremenija verzija UAM modela. Sadržava dvosmjerno ugnježdenu mrežu (*two-way grid nesting*). Dozvoljava regionalno skaliranje ozona, transport polutanata i više urbanih središta da budu obrađeni unutar jedne domene. Također, UAM-V program dopušta variabilnost u broj i međusobnom razmaku slojeva (layera), specifikaciju tro-dimenzionalnih meteoroloških varijabli i eksplicitnu obradu podmrežnih fotokemijskih perjanica (*plumes*) (*plumes-in-grid treatment*). Software UAM je u potpunosti prerađen u modularni oblik za UAM-V verziju i uključuje dodane vrste taloga, novi mehanizam dizanja dima, solarni flux i kemijsko kinetičke module.

4.1 PREGLED PROGRAMA

UAM-V model je trodimenzionalni fotokemijski mrežni model dizajniran da izračunava inertne i kemijski reaktivne zagađivače tako da simulira fizikalne i kemijske procese u atmosferi koji utječu na konačnu koncentraciju polutanata u zraku. Osnova za model je atmosferska difuzija ili jednadžba kontinuiteta svih polutanata. Ova jednadžba predstavlja jednadžbu očuvanja mase u kojoj su sve relevantne emisije, transporti, difuzija, kemijske reakcije i procesi uklanjanja izraženi u matematičkim izrazima. Model simulacije ozona primijenjuje se najčešće u periodu od 48 do 120 sati. Glavni čimbenici koji utječu na kvalitetu zraka:

- prostorna i vremenska distribucija NO_x-a i organskih lakohlapljivih spojeva VOC (antropogenih i biogenih)

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	16
		Listova :	83

- spoj ispuštenog VOC i NO_x
- prostorne i vremenske varijacije u polju vjetra
- dinamika rubnog sloja, uključujući stabilnost i nivo mješanja
- kemijske reakcije koje uključuju VOC, NO_x i ostale važne efluente
- dnevne varijacije solarne insolacije i temperature
- gubitak ozona kod suhih i mokrih taloga
- VOC, NO_x i ostali efuenti donešeni vjetrom i iznad područja promatranja

Kada želimo izračunati koncentraciju ozona program simulira navedene procese. Može se također koristiti kod simulacije ugljik-monoksida u gradskim područjima, takva simulacija ne uključuje kemijske reakcije. Taj model rješava jednadžbu kontinuiteta efluenta koristeći metodu razlomljenih koraka (fractional steps), u kojoj se individualni dijelovi jednadžbe rješavaju odvojeno na slijedeći način: ubacuju se emisije, rješava se vodoravna advekcija/difuzija i taloženje; izvode se kemijske transformacije za reaktivne zagađivače. UAM-V program izvodi tu proceduru rješavanja u četiri koraka za vrijeme svakog koraka advekcije. Maksimalni vremenski korak advekcije je funkcija veličine mreže i maksimalne brzine vjetra ili koeficijenta horizontalne difuzije. Kemijske reakcije i vertikalna difuzija rješavaju se odvojeno u ovisnosti o vremenskom koraku advekcije da bi održali individualnu numeričku shemu stabilnu.

Budući da UAM-V model računa vremenske i prostorne varijacije kao i razlike u reaktivnosti emisija, idealan je za procjenjivanje učinaka scenarija kontrole emisije u urbanim dijelovima odnosno pogodan je za simulaciju kvalitete zraka u urbanim područjima. Procjena počinje tako da se replicira prijašnja ozonska epizoda da bi se postavila simulacija osnovnog slučaja. Ulazni podaci pripremljeni su od promatranih meteoroloških podataka, podataka o emisiji i kvaliteti zraka za određeni dan ili dane koristeći prognostičko meteorološko modeliranje i/ili diagnostičke i interpolacijske metode modeliranja. Model se tada pokreće sa tim podacima i procjenjuju se rezultati da bi se odredila izvedba. Jednom kada se rezultati modela procjene i odredi se da

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 17
		Listova : 83

budu unutar propisanih razina, mogu se koristiti isti meteorološki podaci i podaci o emisiji za moguće buduće scenarije.

4.2 POVIJEST RAZVOJA MODELA

UAM model se konstantno razvija već preko 20 godina, uključujući više od 100 ljudi koji godišnje rade na njemu. Mnoge organizacije ga podržavaju. Javne i privatne organizacije doprinijele su u naporima da se pokaže korist UAM modela kako bi se istražio kompleksni problem zagađenja zraka. Povijest i razvoj matematičkih fotokemijskih modela, posebno UAM-a, napreduje u tri područja:

- Znanstveno područje, koje je određeno prihvaćanjem odgovarajućih formulacija, algoritama koji predstavljaju pripadajuće fizikalne i kemijske procese i metodama mjerenja i baza podataka koje podržavaju procjenu parametara i izvedbe modela.
- Zakonsko područje, koje je određeno važnošću i praktičnošću UAM modela, za propise koji se razvijaju i prihvaćanjem tog modela od strane onih koji donose odluke
- Područje tehnologije, koje je određeno raspoloživošću kompjutera koji su opremljeni za velike numeričke modele, mogućnošću transporta UAM modela do tih sustava i relativno lakom prilagođenošću korisniku

Od 1969. godine, kad je UAM program bio u začetku, desile su se značajne promjene na sva tri područja. Neke od tih promjena su bile predviđene, neke su bile potpuno van kontrole, čak iako su bile predviđene, a neke uopće nisu bile predviđene. Početni razvoj modela i faza procjene, od 1969 do 1973. kulminirali su mišljenjem EPA-e i njenih recenzenata da je UAM pristup praktičan i izvediv. To je dovelo do daljnjeg razvoja. Javna verzija programa iz 1980. godine sadržavala je Carbon-Bond Mehanizama (CB-II) (mehanizam ugljikovih veza). Prateći tehnološki razvitak i iskustvo s mnogim različitim primjenama UAM sustava, verzija tog modela modernizirana je 1988. godine. Dva glavna poboljšanja bila je ugradnja Carbon Bond Mehanizma IV (CB-IV) i korištenje Smolarkiewicz numeričke integracijske sheme da bi se riješila

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 18
		Listova : 83

advekcijaska jednadžba. Ta verzija UAM modela puštena je u javnost u lipnju 1990. godine. Iako je ta verzija najkorišteniji model za simulaciju kvalitete zraka u svijetu (simulaciju ozona), struktura softwera bazira se na kompjuterskom programiranju od 1970 – 1980. godine i nema prednosti brzine sadašnjih i budućih računalnih sustava. Tako je između 1989 i 1991 SAI započeo posao prerađivanja modela. UAM program je poboljšán i pojačan, programski kod je moderniziran i dodane su nove radne sposobnosti, algoritmi, moduli i obilježja. Rezultat, UAM model sustav ima slijedeća dodatna obilježja u usporedbi s verzijom iz 1990. godine.

1. Strukturalni modularni kompjuterski kod
 - kod je napisan u modularnom obliku da bi se lakše priključili novi moduli i da se iskoriste prednosti modernih kompjutera
2. Okomito mrežasta struktura
 - Strukturu vertikalnog sloja može definirati i korisnik. To omogućuje okomite slojeve više rezolucija bližih površini i bolje poklapanje s izlazom iz prognostičkih meteoroloških modela, koji obično koriste koordinatni sustav koji slijedi teren.
3. Trodimenzionalni unos podataka
 - Nekoliko meteoroloških varijabli koje su u UAM CB-IV bile smatrane za prostorno konstantne, sada variraju vremenski i prostorno (npr. temperatura, vlažnost zraka, tlak, stupanj fotolize). Nadalje, kao ulazni podaci sada se traže vodoravna difuzija i vertikalni koeficijenti difuzije (obično se izračunaju sa meteorološkim modelom).
4. Rezolucija sa mrežom za izračun kemijske kinetike
 - Kada to situacija dozvoljava, izračunavanje kemijskih reakcija može se izvoditi na skupini ćelija bolje nego na svakoj pojedinoj da bi se smanjilo vrijeme izračunavanja
5. Dvosmjerno ugnježđena mreža
 - Finije mreže mogu se umetnuti u grublje mreže da bi se dobio detaljniji prikaz advekcije/difuzije, kemijskih reakcija i emisija. Može se smjestiti nekoliko slojeva ugnježđivanja.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 19
		Listova : 83

6. Poboljšani CB-IV mehanizam

- Carbon Bond (uglična veza) mehanizam je upotpunjen novim pdacima. Dodana je reakcija $XO_2 - HO_2$ zajedno s novim temperaturnim učincima za PAN reakcije. Kao opcija dodana je i kemijska reakcija (vodene pare) oblaka.

7. Algoritam novog suhog taloženja

- Formulirao je Wesley (1989) i umetnut je u UAM-V program. Taj algoritam je sličan onom, koji je koristio RADM.

8. Stvarna ravnoteža masenih protoka

- Koncentracije su odnašane i raspršene u modelu koristeći jedinicu mase po jedinici volumena radije nego volumetričke jedinice (ppm). Kada se dani iznos ppm polutanata pomakne u mreži u slijedeću ćeliju koje ima različitu temperaturu ili pritisak, postoji različiti iznos mase unutar ćelije za isti ppm (zakon idealnog plina). Kada se koristi masa po jedinici volumena održava se zakon očuvanja mase.

9. Perjanica u mreži

- Emisije iz točkastih izvora mogu se obrađivati pod mrežnom podjelom Lagrangovim fotokemijskim modelom dima. Masa polutanata se otpušta iz modela pod mrežne podjele u model mreže kada je veličina perjanice proporcionalna sa veličinom ćelije u mreži.

10. Algoritam rasta perjanice

- Novi algoritam rasta dima je dodana na temelju Gausovog disperzijskog modela.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 20
		Listova : 83

4.3 ULAZNI PODACI POTREBNI ZA SIMULACIJU SA UAM-V PROGRAMOM

Pretpostavke UAM-V o koncentraciji polutanata izračunavaju se od emisija, advekcije i disperzije prethodnih polutanata i formacije i taloga polutanata unutar svake ćelije u domeni. Da bi se adekvatno replicirala potpuna trodimenzionalna struktura atmosfere za vrijeme ozonske epizode, UAM-V program zahtijeva dnevne podatke, svakog sata. Potrebno je nekoliko preprocesorskih programa (koraka) da bi se prevele grube emisije, meteorološki podaci, kvaliteta zraka i podaci specifični za mrežu da bi se razvio završni UAM-V ulazni fajl. Nova obilježja UAM-V modela zahtijevaju sveobuhvatnije ulazne podatke nego što je to bilo u ranijoj verziji. Za one koji su upoznati sa ulaznim podacima potrebnim za UAM model, usporedba UAM i UAM-V ulaznih podataka prikazana je u tablici 1.

Tip podataka	UAM podaci	UAM-V podaci
Meteorološki	VJETAR (x, y – komponenta brzine)	VJETAR (x, y – komponenta brzine)
	TEMPERATURA (temp. na površini)	TEMPERATURA (3D matrica)
	METSCALARS	H2O (3D matrica vlažnosti)
	DIFFBREAK	VDIFFUSION (vertikalna difuzija)
	REGIONTOP (visina regije, na vrhu)	HEIGHT (3D matrica visina i tlakova)
		RAIN (2D matrica, količina padalina)
		CLOUD (podaci o oblacima)
Karakteristike tla	TERRAIN (grubost terena)	SURFACE (mrežno podjeljena prekrivenost tla)
		TERRAIN (visine terena)
Emisije	EMISSIONS (emisije sa tla)	EMISSIONS (emisije sa tla)
	PTSOURCE (izdignute emisije)	PTSOURCE (izdignute emisije)
Početni i rubni uvjeti	AIRQUALITY (početne koncentracije)	AIRQUALITY (početne koncentracije)
	BOUNDARY (koncentracije na rubu)	BOUNDARY (koncentracije na rubu)
	TOPCONC (koncentracije na vrhu)	TOPCONC (koncentracije na vrhu)
Kemijske reakcije	CHEMPARAM	CHEMPARAM
		RATES (vrijednosti fotolize)
		ALBEDO/HAZE/OZCOL
Control	SIMCONTROL (informacije o simulaciji)	CONTROL (informacije o simulaciji)
		AGGMAP

Tablica 1. UAM i UAM-V ulazni podaci

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 21
		Listova : 83

Uspješne simulacije formacije i transporta ozona su najlakše sa povećanom bazom meteoroloških podataka, ipak nedavna primjena UAM modela na pet američkih gradova pokazala je da korištenje meteorološke baze podataka i podataka o kvaliteti zraka za UAM i UAM-V ulazne podatke moguć je i sa manje kompleksnom opskrbom zraka u geografskom području (airshed). Promatrani podaci o kvaliteti zraka koriste se za procjenu predviđanja modela. Ti podaci se također mogu koristiti za ozon, NO_x i eterične organske spojeve (VOC). UAM-V model se obično koristi za simulaciju multidnevne epizode i simulacija započinje za vrijeme ranih jutarnjih sati dan prije početka epizode. Dan prije se koristi da bi se ograničio utjecaj početnih koncentracija (koje nisu dobro poznate) na simulaciju dana primarne epizode.

4.3.1 Visine slojeva i tlak

UAM-V mreža sastoji se od fiksnog broja okomitih slojeva čija gustoća može varirati u vremenu ili prostoru. Visine iznad prizemnog nivoa i atmosferski pritisak na srednjoj točki mora biti specificiran svaki sat. Obično se utvrđuje da su te vrijednosti konzistentne sa strukturom mreže koja se koristi u prognostičkom meteorološkom modelu koji se koristi da omogući ulazne podatke za UAM-V program.

4.3.2 Vrsta tla i površinski albedo

Vrsta tla definirana je u 11 kategorija (tablica 2.) tla u svakoj vodoravnoj mrežnoj lokaciji. Koristi se pri računanju taloženja tvari. Vrsta tla se obično dobije tako da se uzima prosjek od geografskog informacijskog sustava za svaku ćeliju u mreži. Albedo indeksi i površinska hrapavost koji se baziraju na vrsti tla također su potrebni za svaku vodoravnu mrežnu lokaciju.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 22
		Listova : 83

Broj kategorije	Vrsta tla	Grubost tla (m)	UV Albedo
1	Urbano područje	3,00	0,08
2	Agrikulturalno područje	0,25	0,05
3	Ravnica	0,05	0,05
4	Šuma bjelogorice	1,00	0,05
5	Zimzelena šuma, močvare	1,00	0,05
6	Mješana šuma	1,00	0,05
7	Vodene površine	0,0001	0,04
8	Nepolodna zemlja	0,002	0,08
9	Močvarno područje	0,15	0,05
10	Mješano područje (ravnice i agrikultura)	0,10	0,05
11	Planine	0,10	0,05

Tablica 2. indeksi grubosti tla i albedo indeksi

4.3.3 Teren

Omrežene terenske visine iznad nivoa mora specificirane su za domenu grube mreže. Ipak, vrijednosti visina terena ne koriste se u sadašnjoj verziji modela. Utjecaj terena UAM-V programa dobiva iz meteoroloških podataka. Teren datoteka sadržava koordinate grube mreže, broj ćelija u x i y smjeru i podatke geografske dužine i širine područja – domene.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	23
		Listova :	83

4.3.4 Komponente vjetra

Vodoravne komponente vjetra (u i v) moraju se specificirati svakog sata za jednu ili dvije opcionalne konfiguracije: vjetrovi u svakom centru ćelije ili vjetrovi poredani u vodoravni interface umreženih ćelija. Vjetrovi se koriste da bi se procijenili vodoravni advekcijски uvjeti u advekcisko/difuzijskoj jednadžbi, izračunavale okomite brzine, površinski sloj parametara za talog, odredile karakteristike dizanja dima i dijagnosticirali koeficijenti difuzije.

4.3.5 Vertikalni koeficijenti

Koeficijenti okomite turbulentne difuzije moraju se specificirati svaki sat na vrhu svake ćelije. Okomiti koeficijenti difuzije potrebni su za procjenu okomitog djelovanja izraza podmrežne razmjene u jednadžbi advection/diffusion. Te vrijednosti se obično dobiju ili iz prognostičkog meteorološkog modela ili od predprocesora koji koristi umreženje UAM-V ulazne podatke o vjetru i temperaturi.

4.3.6 Temperatura

Temperatura se mora specificirati svaki sat u centru ćelije. Temperatura zraka na površini mora se specificirati za svako polje u sloju 1. Informacija o temperaturi je potrebna da bi se odredile određene reakcija u kemijskom modulu i da bi se odredile karakteristike dizanja dima. Površinska temperatura se koristi za izračunavanje suhog taloga.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 24
		Listova : 83

4.3.7 Vodena para

Koncentracija vodene pare mora se specificirati svakog sata u centru svakog polja. Koncentracija vodene pare važna je za procjenu određenih reakcija unutar kemijskog modula.

4.3.8 Početne koncentracije

Od svakog zagađivanja moraju biti specificirane u centru svakog polja. Početne koncentracije mogu biti jednake kroz domenu ili varirati prostorno u tri dimenzije. Početne koncentracije se obično dobiju kroz specificiranje konstantnih vrijednosti preko domene, interpolacijom promatranja, interpolacijom polja proizvedenom kroz modele kvalitete zraka.

4.3.9 Rubne koncentracije

Koncentracije svakog zagađivača mora se specificirati svakog sata u centru svakog polja uzduž lateralnih granica i preko vrha domene modela. Rubna stanja mogu biti jednaka ili varirati vremenski i prostorno. Rubna stanja su potrebna za procjenu o adveksijskim uvjetima transporta u poljima koji graniče sa lateralnim granicama kada se komponenta relevantnog vjetra usmjeri u domenu.

Za izračunavanje koncentracije u najgornjem sloju potrebne su koncentracije visoko u zraku zbog promjena (prostornih ili vremenskih) u visini sloja i dubini ili kad su okomite brzine usmjerene prema dolje kroz vrh domene. Na proces vertikalne difuzije ne utječu koncentracije koje su visoko zbog nultog difuznog toka na vrhu domene. Rubne koncentracije obično se dobiju od preprocesora koji može specificirati ista ili različita polja ili koji može interpolirati polja drugih modela kvalitete zraka, kao što je ROM.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	25
		Listova :	83

4.3.10 Područni izvori emisija

Ova kategorija područnih izvora uključuje prave izvore (npr. kućne grijače, kemijske čistione, i izvore koji tope), mobilne izvore, točkaste izvore na niskoj razini i biogenske i prirodne izvore. Vrijednosti područnih izvora emisija moraju bit specificirane za svaki pojedini ispušteni efluenat na svakoj vodoravnoj mrežnoj lokaciji; a oni se mogu po izboru specificirati za svaka 24 sata. Područni izvori emisija ispuštaju se u prvi model sloja iznad zemlje.

4.3.11 Podignuti točkasti izvori emisije

Za svaki točkasti izvor koji je lociran unutar domene moraju se specificirati slijedeće informacije: lokacija, visina dimnjaka, promjer dimnjaka, izlazna temperatura dimnjaka, izlazna brzina dimnjaka i vrijednosti emisija (emission rates) za sve polutante. Vrijednosti emisija za svaki točkasti izvor za svaki emitirani polutant mogu se po izboru specificirati odvojeno za svaki od 24 sata. Ovaj fajl također identificira koji točkasti izvori će se obraditi s izbornom PIG obradom ili s punim ili s jednostavnim mehanizmima.

4.3.12 Parametri kemijskih reakcija

Datoteka koja sadrži polutante koji se trebaju simulirati i varijable različitih kemijskih reakcija mora biti dostupna UAM-V programu. Varijable reakcija uključuju vrijednosti plinske i mokre faze reakcija i aktivacije energija. Varijable kemijskih reakcija ne bi se trebale mijenjati za individualnu primjenu. One se samo mijenjaju za vrijeme uspona do kemijskog mehanizma.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 26
		Listova : 83

4.3.13 Vrtložnost i stupac ozona

Indeksi koji definiraju ovisnost vrtložnosti i gustoće stupca ozona korišteni u brzinama fotolize moraju biti specificirani za svaku vodoravnu mrežnu lokaciju. Kao površinski albedo, ti indeksi se koriste da bi locirali ispravne J-vrijednosti za unutaraju kalkulaciju brzine fotolize. Umreženi podaci su dobiveni od predprocesora turbidity/ozone column.

4.4 IZLAZ MODEL

UAM-V model omogućuje umrežni prosječan po satu i trenutni koncentracijski izlaz svih simuliranih polutanata i mreža. Odvojeni koncentracijski izlaz fajl se daje sa svakim korištenim u gnježđenom mrežom. Prosječne koncentracije po satu predviđene su za usporedbu sa standardnim mjerama. Trenutni koncentracijski izlazni fajl se primarno koristi da se restarta model. Nekoliko diagnostičkih datoteka su također izlazni fajlovi. Oni sadrže informacije o kompjuterskim resursima (pomoćnim sredstvima) koji su potrebni za vrijeme računanja simulacije, dijagnostika različitih numeričkih shemi dijagnostika ulaznih podataka i odabranim izračunatim vrijednostima (brzina taloga i PIG varijable). Svi fajlovi će također pokazati svaku pogrešku ili upozoravajuću poruku.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 27
		Listova : 83

4.5 MATEMATIČKA FORMULACIJA

Varijabilni mrežni UAM-V sustav je trodimenzionalni mrežni model dizajniran da izračuna koncentracije internih i kemijskih reaktivnih polutanata tako da simulira fizikalne i kemijske procese u atmosferi koji utječu na koncentracije polutanata. Osnova za UAM-V model je jednadžba atmosferske difuzije koja se također zove i jednadžba kontinuteta svih polutanata. Ta jednadžba predstavlja ravnotežu mase u kojoj su sve relevantne emisije, transport, difuzija, kemijske reakcije i procesi od uklanjanja u sljedećim matematičkim izrazima:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial(uc_i)}{\partial x} + \frac{\partial(v c_i)}{\partial y} + \frac{\partial(w c_i)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_X \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_Y \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_V \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) + R_i + S_i + D_i + W_i$$

c_i	=	koncentracija polutanata i , funkcija prostora (x,y,z) i vremena (t)
u,v,w	=	vodoravne i okomite komponente brzine vjetra
K_X, K_Y	=	vodoravni turbulentni koeficijenti difuzije
K_V	=	okomiti turbulentni koeficijenti difuzije
R_i	=	brzine produkcije polutanata i kroz kemijske reakcije
S_i	=	vrijednosti emisije polutanata i
D_i	=	brzine promjene polutanata i zbog površinskog procesa
W_i	=	brzine promjene polutanata i zbog procesa taloženja

Model primjenjuje numeričke tehnike konačne razlike rješavanje jednadžbe advekcije/difuzije. Područje koje će se simulirati, podijeli se u nekoliko trodimenzionalnih mreža koje pokrivaju cijelo to područje. Prvo se mora definirati osnovna gruba mreža koja pokriva cijelu domenu; finije ugnježđene mreže, unutar grube mreže moraju se definirati za područja u kojima se žele provesti finija analiza. Taj model prihvaća ugnježđenje i u horizontali i u vertikali, te dozvoljava onoliko slojeva

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	28
		Listova :	83

ugnježđenja koliko ih se želi. Okomiti sloj strukture UAM-V modela može definirati svojevoljno sam korisnik. Obično se okomiti slojevi definiraju tako da odgovaraju okomitom sloju strukture korištenog meteorološkog modela za UAM-V meteorološki ulaz (za razliku od prijašnjih UAM modela, vertikalna struktura ne ovisi o visini mješanja). Ugnježđenje UAM-V mreže u vertikali dopušta korištenje visoke rezolucije u područjima gdje je potrebna.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	29
		Listova :	83

4.6 ATMOSFERSKE KEMIJSKE REAKCIJE

4.6.1 Kemija plinske faze

Ozon u atmosferi se formira kroz kemijsku reakcije između dušičnog oksida (NO_x) i hlapljivih organskih spojeva (VOC). Stotine organskih spojeva i tisuće reakcija sudjeluju u formiranje ozona u atmosferi. Eksplicitna obrada svih tih sastojaka i reakcija bila bi kompleksna u modelu baziranim na Euler-ovoj mreži kao što je UAM program. K tome, većina fotokemijskih kinetičkih mehanizama obrađuje organske spojeve u grupama često na osnovi reaktivnih funkcionalnih grupa koje sadržavaju.

UAM-V program primjenjuje proširenu verziju mehanizma ugljične veze (CB-IV) za rješavanje kemijske kinetike. The *carbon-bond* pristup, rastavlja organske polutante bazirane na ugljikovim vezama organskih spojeva. Npr. propylene, butan i 1-penten svaki imaju jedan olefinsku dvostruku ugljičnu vezu ali imaju i različite brojeve jednostruke ugljične veze. U mehanizmu ugljičnih veza propilen, butan i 1-penten bi se podjelili u *jedan olefinsku vezu* (OVE) i u *jedan , dva i tri parafinsku vezu* (PAR)

Kao što je ovdje izvršeno CB-IV sadrži preko 90 reakcija i preko 30 kemijskih polutanata . Te reakcije su prikazane u tablici 3. Tablica popisuje sve polutante koje mehanizam obrađuje.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 30
		Listova : 83

Reaction		Rate Constant ^a @ 298 K (ppm ⁻ⁿ min ⁻¹)	E/R (K)
1	NO ₂ → NO + O	Radiation Dependent ^b	
2	O → O ₃	4,323,000	-1175
3	O ₃ + NO → NO ₂	26.64	1370
4	O + NO ₂ → NO	13,750	0
5	O + NO ₂ → NO ₃	2309	-687
6	O + NO → NO ₂	2438	-602
7	NO ₂ + O ₃ → NO ₃	0.04731	2450
8	O ₃ → O	0.053 × k ₁	
9	O ₃ → O ₁ D	Radiation Dependent ^b	
10	O ₁ D → O	424,600	-390
11	O ₁ D + H ₂ O → 2 OH	3.26	0
12	O ₃ + OH → HO ₂	100	940
13	O ₃ + HO ₂ → OH	3	580
14	NO ₃ → 0.89 NO ₂ + 0.89 O + 0.11 NO	33.9 × k ₁	
15	NO ₃ + NO → 2 NO ₂	44,160	-250
16	NO ₃ + NO ₂ → NO + NO ₂	0.5901	1230
17	NO ₃ + NO ₂ → N ₂ O ₅	1853	-256
18	N ₂ O ₅ + H ₂ O → 2 HNO ₃	1.9 × 10 ⁻⁶	0
19	N ₂ O ₅ → NO ₃ + NO ₂	2.776	10,900
20	NO + NO → 2 NO ₂	0.00015	-530
21	NO + NO ₂ + H ₂ O → 2 HONO	3.0 × 10 ⁻⁸	-6348
22	NO + OH → HONO	9799	-806
23	HONO → NO + OH	0.1975 × k ₁	
24	HONO + OH → NO ₂	9770	0
25	HONO + HONO → NO + NO ₂	0.00002	0
26	NO ₂ + OH → HNO ₃	16,820	-713
27	HNO ₃ + OH → NO ₃	217.9	-1000
28	NO + HO ₂ → OH + NO ₂	12,270	-240
29	NO ₂ + HO ₂ → PNA	2025	-749
30	PNA → HO ₂ + NO ₂	5.115	10,121
31	PNA + OH → NO ₂	6833	-380

Tablica 3.1. kemijske reakcije mehanizma ugljikovih veza

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 31
		Listova : 83

Reaction		Rate Constant ^a @ 298 K (ppm ⁻ⁿ min ⁻¹)	E/R (K)
32	HO ₂ + HO ₂ → H ₂ O ₂	4144	-1150
33	HO ₂ + HO ₂ + H ₂ O → H ₂ O ₂	0.2181	-5800
34	H ₂ O ₂ → 2 OH	0.255 × k ₃₉	
35	H ₂ O ₂ + OH → HO ₂	2520	187
36	CO + OH → HO ₂	322	0
37	FORM + OH → HO ₂ + CO	16,300	110
38	FORM → 2 HO ₂ + CO	Radiation Dependent ^b	
39	FORM → CO	Radiation Dependent ^b	
40	FORM + O → OH + HO ₂ + CO	237	1550
41	FORM + NO ₃ → HNO ₃ + HO ₂ + CO	0.93	0
42	ACET + O → C ₂ O ₃ + OH	636	986
43	ACET + OH → C ₂ O ₃	21,900	-205
44	ACET + NO ₃ → C ₂ O ₃ + HNO ₃	4.03	1860
45	ACET → FORM + 2 HO ₂ + CO + XO ₂	Radiation Dependent ^b	
46	C ₂ O ₃ + NO → FORM + NO ₂ + HO ₂ + XO ₂	28,200	180
47	C ₂ O ₃ + NO ₂ → PAN	13,700	-380
48	PAN → C ₂ O ₃ + NO ₂	0.0254	13,500
49	C ₂ O ₃ + C ₂ O ₃ → 2 FORM + 2 XO ₂ + 2 HO ₂	24,500	-530
50	C ₂ O ₃ + HO ₂ → 0.33 O ₃	20,900	-1040
51	CH ₄ + OH → FORM + XO ₂ + HO ₂	10.34	1710
52	PAR + OH → 0.87 XO ₂ + 0.13 XO ₂ N + 0.11 HO ₂ + 0.06 ACET - 0.11 PAR + 0.76 ROR + 0.05 ALDX	1203	0
53	ROR → 0.96 XO ₂ + 0.6 ACET + 0.94 HO ₂ + 2.1 PAR + 0.04 XO ₂ N + 0.02 ROR + 0.5 ALDX	137,100	8000
54	ROR → HO ₂	95,445	0
55	ROR + NO ₂ → NTR	22,000	0
56	OLE + O → 0.24 ACET + 0.38 HO ₂ + 0.28 XO ₂ + 0.3 CO + 0.2 FORM + 0.02 XO ₂ N + 0.22 PAR + 0.2 OH + 0.39 ALDX	5920	324
57	OLE + OH → FORM + 0.38 ACET + 0.62 ALDX - PAR + XO ₂ + HO ₂	42,000	-504
58	OLE + O ₃ → 0.19 ACET + 0.31 ALDX + 0.74 FORM + 0.22 XO ₂ + 0.1 OH + 0.33 CO + 0.44 HO ₂ - PAR	0.018	2105

Tablica 3.2. kemijske reakcije mehanizma ugljikovih veza

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 32
		Listova : 83

Reaction		Rate Constant ^a @ 298 K (ppm ⁻ⁿ min ⁻¹)	E/R (K)
59	OLE + NO ₃ → 0.91 XO ₂ + FORM + 0.09 XO ₂ N + 0.35 ACET + 0.56 ALDX + NO ₂ - PAR	11.35	0
60	ETH + O → FORM + 1.7 HO ₂ + CO + 0.7 XO ₂ + 0.3 OH	1080	792
61	ETH + OH → XO ₂ + 1.56 FORM + 0.22 ALDX + HO ₂	11,920	-411
62	ETH + O ₃ → FORM + 0.42 CO + 0.12 HO ₂	0.0027	2633
63	TOL + OH → 0.44 HO ₂ + 0.08 XO ₂ + 0.36 CRES + 0.56 TO ₂	9150	-322
64	TO ₂ + NO → 0.9 XO ₂ + 0.9 HO ₂ + 0.9 OPEN + NO + 0.1 XO ₂ N	12,000	0
65	TO ₂ → CRES + HO ₂	250	0
66	CRES + OH → 0.4 CRO + 0.6 XO ₂ + 0.6 HO ₂ + 0.3 OPEN	61,000	0
67	CRES + NO ₃ → CRO + HNO ₃	32,500	0
68	CRO + NO ₂ → NPHN	20,000	0
69	OPEN → C ₂ O ₃ + HO ₂ + CO	9.04 × k ₃₈	
70	OPEN + OH → XO ₂ + 2 CO + 2 HO ₂ + C ₂ O ₃ + FORM	44,000	0
71	OPEN + O ₃ → 0.03 ALDX + 0.62 C ₂ O ₃ + 0.7 FORM + 0.03 XO ₂ + 0.69 CO + 0.08 OH + 0.76 HO ₂ + 0.2 MGLY	0.015	500
72	XYL + OH → 0.7 HO ₂ + 0.5 XO ₂ + 0.2 CRES + 0.8 MGLY + 1.1 PAR + 0.3 TO ₂	36,200	-116
73	MGLY + OH → XO ₂ + C ₂ O ₃	26,000	0
74	MGLY → C ₂ O ₃ + HO ₂ + CO	0.022 × k ₁	
75	ISOP + O → 0.75 ISPD + 0.50 FORM + 0.25 XO ₂ + 0.25 HO ₂ + 0.25 CXO ₃ + 0.25 PAR	53,200	0
76	ISOP + OH → 0.912 ISPD + 0.629 FORM + 0.991 XO ₂ + 0.912 HO ₂ + 0.088 XO ₂ N	147,600	-407.6
77	ISOP + O ₃ → 0.65 ISPD + 0.60 FORM + 0.20 XO ₂ + 0.066 HO ₂ + 0.266 OH + 0.20 CXO ₃ + 0.15 ALDX + 0.35 PAR + 0.066 CO	0.019	1912
78	ISOP + NO ₃ → 0.20 ISPD + 1.0 XO ₂ + 0.80 HO ₂ + 0.20 NO ₂ + 0.80 ALDX + 2.4 PAR + 0.8 NTR	996	448
79	XO ₂ + NO → NO ₂	12,000	0
80	XO ₂ + XO ₂ →	2000	-1300
81	XO ₂ N + NO → NTR	12,000	0
82	ETOH + OH → HO ₂ + 0.95 ACET + 0.78 FORM + 0.05 XO ₂ + 0.011 ALDX	4840	66.8
83	ETOH + NO ₃ → HO ₂ + ACET + HNO ₃	1.33	0
84	MEOH + OH → FORM + HO ₂	1375	0
85	MEOH + NO ₃ → HO ₂ + FORM + HNO ₃	0.33	0

Tablica 3.3. kemijske reakcije mehanizma ugljikovih veza

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	33
		Listova :	83

	Reaction	Rate Constant ^a @ 298 K (ppm ⁻ⁿ min ⁻¹)	E/R (K)
59	OLE + NO ₃ → 0.91 XO ₂ + FORM + 0.09 XO ₂ N + 0.35 ACET + 0.56 ALDX + NO ₂ - PAR	11,35	0
60	ETH + O → FORM + 1.7 HO ₂ + CO + 0.7 XO ₂ + 0.3 OH	1080	792
61	ETH + OH → XO ₂ + 1.56 FORM + 0.22 ALDX + HO ₂	11,920	-411
62	ETH + O ₃ → FORM + 0.42 CO + 0.12 HO ₂	0.0027	2633
63	TOL + OH → 0.44 HO ₂ + 0.08 XO ₂ + 0.36 CRES + 0.56 TO ₂	9150	-322
64	TO ₂ + NO → 0.9 XO ₂ + 0.9 HO ₂ + 0.9 OPEN + NO + 0.1 XO ₂ N	12,000	0
65	TO ₂ → CRES + HO ₂	250	0
66	CRES + OH → 0.4 CRO + 0.6 XO ₂ + 0.6 HO ₂ + 0.3 OPEN	61,000	0
67	CRES + NO ₃ → CRO + HNO ₃	32,500	0
68	CRO + NO ₂ → NPHN	20,000	0
69	OPEN → C ₂ O ₃ + HO ₂ + CO	9.04 × k ₃₈	
70	OPEN + OH → XO ₂ + 2 CO + 2 HO ₂ + C ₂ O ₃ + FORM	44,000	0
71	OPEN + O ₃ → 0.03 ALDX + 0.62 C ₂ O ₃ + 0.7 FORM + 0.03 XO ₂ + 0.69 CO + 0.08 OH + 0.76 HO ₂ + 0.2 MGLY	0.015	500
72	XYL + OH → 0.7 HO ₂ + 0.5 XO ₂ + 0.2 CRES + 0.8 MGLY + 1.1 PAR + 0.3 TO ₂	36,200	-116
73	MGLY + OH → XO ₂ + C ₂ O ₃	26,000	0
74	MGLY → C ₂ O ₃ + HO ₂ + CO	0.022 × k ₁	
75	ISOP + O → 0.75 ISPD + 0.50 FORM + 0.25 XO ₂ + 0.25 HO ₂ + 0.25 CXO ₃ + 0.25 PAR	53,200	0
76	ISOP + OH → 0.912 ISPD + 0.629 FORM + 0.991 XO ₂ + 0.912 HO ₂ + 0.088 XO ₂ N	147,600	-407.6
77	ISOP + O ₃ → 0.65 ISPD + 0.60 FORM + 0.20 XO ₂ + 0.066 HO ₂ + 0.266 OH + 0.20 CXO ₃ + 0.15 ALDX + 0.35 PAR + 0.066 CO	0.019	1912
78	ISOP + NO ₃ → 0.20 ISPD + 1.0 XO ₂ + 0.80 HO ₂ + 0.20 NO ₂ + 0.80 ALDX + 2.4 PAR + 0.8 NTR	996	448
79	XO ₂ + NO → NO ₂	12,000	0
80	XO ₂ + XO ₂ →	2000	-1300
81	XO ₂ N + NO → NTR	12,000	0
82	ETOH + OH → HO ₂ + 0.95 ACET + 0.78 FORM + 0.05 XO ₂ + 0.011 ALDX	4840	66.8
83	ETOH + NO ₃ → HO ₂ + ACET + HNO ₃	1.33	0
84	MEOH + OH → FORM + HO ₂	1375	0
85	MEOH + NO ₃ → HO ₂ + FORM + HNO ₃	0.33	0

Tablica 3.4. kemijske reakcije mehanizma ugljikovih veza

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	34
		Listova :	83

UAM V model sadrži značajna poboljšanja tj. moderniziraju CB-IV mehanizama koju je predložio Dodge i ostali: novija informacija o učincima PAN temp. (reakcije 46-48), uključivanje radikal-radikal reakcije koja djeluje kao ponor radikal po zakonu NO_x koncentracijskih uvijeta (reakcija 86) i reridirane kemijske reakcije isoprena koje je predložio Castes. Različite jednadžbe koje opisuju CB-IV su kruti sustav; tj. jednadžbe sadrže široke varijacije u vremenskim konstantama (reaction rate). Rješavanje tih jednadžbi sa konvencionalnim numeričkim integratorom za krute sustave, kao što je onaj koji je razvio Gear, rezultirali bi u skupom kompjuterskom vremenu.

4.6.2 Prijenos zagađivača

Zagađivači se prenose ponajprije advekcijom, tj. prosječnim i opsežnim kretanjem zraka. Točni prikaz snage i varijabilnosti vjetrova unutar područja prostorno-vremenske simulacije je stoga od ključne važnosti za uspješnu primjenu modela UAM-V.

Advekcija (advection) u modelu UAM-a se obrađuje specificiranjem horizontalnih polja vjetra (npr. u i v komponente vjetra u svakom mrežnom polju) za svaki vertikalni sloj i svaku smještenu mrežu (unutar druge). Vertikalna brzina u koordinatnom sustavu UAM-V-a koji prati teren se tada izračunava iz jednadžbe za očuvanje mase.

Model UAM-V se primarno oslanjao na izlaz prognostičkog meteorološkog modela pri definiranju polja vjetra (Morris 1991a,b, 1992a,b; Myers, 1991), premda se model primjenjivao i koristeći polja vjetra stvorena s pomoću tehnika objektivne analize visinskih i površinskih meteoroloških promatranja. (Morris 1991,c).

UAM-V program je postavljen s opcijom da prima meteorološke unose na Arakawa-C mreži uz uobičajenu konfiguraciju definiranja svih meteoroloških varijabli u središtima mrežnih polja. Ta opcija se preporučuje ako će se meteorološki unosi generirati iz izlaznog meteorološkog modela koji koristi Arakawa-C mrežu (npr. CALRAMS). U Arakawa-C konfiguraciji, temperatura i tlak se određuju u središtima mrežnih polja dok se brzine vjetra određuje na rubovima polja što smanjuje udaljenost koja se koristi kod izračunavanja derivacija horizontalnih komponenti vjetra sa $2\Delta x$ na Δx . U određenim

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	35
		Listova :	83

situacijama (npr. zona konvergencije jezerskog povjetarca) to može poboljšati sposobnost UAM-V modela da prikaže vertikalni prijenos.

Pozitivno-konačna shema advekcije koju je razvio Smolarkiewicz (1983) se koristi za prikaz horizontalne advekcije u modelu UAM-V. Ta shema je prilagođena i mreži centriranoj na središte polja i Arakawa-C (cik-cak) mreži. U testovima u idealnim uvjetima, nekoliko drugih advekcijskih algoritama pokazuje manju numeričku difuziju od Smolarkiewiczovog algoritma, ali zahtijevaju znatno više vremena za izračunavanje (Chock, 1991). Još se treba pokazati hoće li ti drugi algoritmi pokazati primjetno drukčija rješenja od Smolarkiewiczovog u reprezentativnim stvarnim svjetovnim uvjetima tijeka.

4.6.3 Smještaj (gniježđenje) mreža

Model UAM-V pruža dvosmjerni interaktivni smještaj sitnih mreža unutar grubljih mreža i u horizontali i u vertikali. Sitna mreža mora biti smještena potpuno unutar područja grube mreže, rubovi sitne mreže moraju se poklapati s rubovima polja grube mreže i sitnije mreže moraju biti pravokutnog oblika (ili trapezoidnog ako se koristi širina/dužina koordinatni sustav). Sitna mreža može biti horizontalno podijeljena bilo kojim oblikom unutarnje podjele grublje mreže u koju je umetnuta. Može biti puno sitnih mreža unutar grube i može postojati nekoliko nivoa smještaja (npr. sitnije mreže umetnute unutar umetnute sitne mreže); međutim, sitne se mreže ne mogu međusobno preklapati. Taj pristup smještaju mreža je provjeren da osigurava točnost i masovnu konzistentnost (Morris, 1991 a, b, 1992 a,b; Myers, 1991).

Datoteke s podacima o mrežnim emisijama niske razine se moraju unijeti zasebno za grube i sitne mreže. Podaci o upotrebi zemlje, vjetru i difuznosti se mogu opcionalno specificirati zasebno ili interpolirati iz unosa za grube mreže. Ostali unosni podaci, poput temperature i koncentracije vodene pare, se uvijek interpoliraju u sitne mreže iz unosa grubih mreža.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 36
		Listova : 83

UAM-V-ova jednadžba o kontinuitetu vrsta uz pomoć smještenih mreža se rješava na sljedeći način:

1. Emisije se ubacuju u grubu mrežu.
2. Prijenos/difuzija/deponiranje su integrirani na gruboj mreži za jedan advektivni (pogonski) vremenski korak.
3. Za svaku sitnu mrežu:
 - a) Ako je potrebno, unosni podaci grube mreže se interpoliraju na sitnu mrežu.
 - b) Pogonski vremenski korak koji se odredi za sitnu mrežu je integralni dio vremenskog koraka grube mreže.
 - c) Emisije se ubacuju.
 - d) Prijenos/difuzija/deponiranje se integriraju.
 - e) Izvode se kemijski proračuni.
 - f) Koraci (c), (d), i (e) se ponavljaju dok ne prođe vremenski period u trajanju vremenskog koraka grube mreže.
4. Kemijski se proračuni vrše u onim mrežnim poljima grube mreže koje nisu pokrivene sitnom mrežom.

Pretpostavka je da je difuzija zagađivača u modelu UAM-V proporcionalna stupnju koncentracije u prostoru ("K-teorija" ili " zaključak prvog reda"). Naziv za faktor proporcionalnosti je koeficijent difuzivnosti vrtloga (K_x , K_y i K_v u jednadžbi advekcije/difuzije).

Horizontalne difuzivnosti se izračunavaju unutar UAM-V programa na osnovu karakteristika deformacije horizontalnog vjetra (Smagorinsky, 1963). Faktori mjerenja se primijenjuju na uvjete deformacije na osnovu kvadrata rezolucije mrežnog polja; maksimalne i minimalne dopuštene horizontalne difuzivnosti određuje korisnik.

Koeficijenti vertikalne turbulentne izmjene mogu se dijagnosticirati iz polja za vjetar i temperaturu u UAM-V ili izravno umetnuti iz K_v polja proračunatih pomoću prognostičkog meteorološkog modela.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 37
		Listova : 83

Uvjeti bez fluxa su označeni na svim bočnim granicama za horizontalnu difuziju i na vrhu modela za vertikalnu difuziju. Donja granica za vertikalnu difuziju je označena kao flux suhog taloženja od sloja 1 do površine.

4.6.4 Procesi površinskog uklanjanja

UAM-V algoritam suhog taloženja se osniva na shemi iz modela RADM koji je opisao Wesley (1989). Ukratko je opisan u sljedećim poglavljima; za potpunije opise, vidi Gray (1991) i Scire (1991).

U modelu se flux zagađivačkog materijala do donje granice (površine) (F_0) izražava kao koncentracija u prvom sloju modela (C_i) puta brzina taloženja (V_d):

$$F_0 = -C_i \cdot V_d$$

Brzina taloženja se proračunava kao inverzna suma serije otpora. Za plinovita vrste to se izražava na sljedeći način:

$$V_d = \frac{1}{R_a + R_b + R_s}$$

R_a = aerodinamički otpor

R_b = otpor graničnog sloja

R_s = površinski otpor

Brzina taloženja vrsta sastavljenih od zasebnih čestica ovisi i o distribuciji veličine i gustoći čestica u pitanju. Velike čestice imaju znatnu brzinu sedimentacije (V_{sed}) koja djeluje paralelno s drugim otporima. Vrlo male čestice se ponašaju na način sličan

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 38
		Listova : 83

plinovima, iako se raspršuju sporije. Pojednostavljeni način izražavanja brzine taloženja čestica je sljedeći:

$$V_d = V_{sed} + \frac{1}{R_a + R_b + R_a R_b V_{sed}}$$

Aerodinamički otpor (R_a) ovisi o karakteristikama površine i uvjetima atmosferske stabilnosti. Izračunava se iz dva parametra sličnosti površinskog sloja: brzine trenja (frikcije) i Monin-Obukhovljeve duljine (vidi Gray, 1991). Granica otpora kvazilaminarnog sloja (R_b) predstavlja proces molekularne difuzije prijenosa zagađivača kroz laminarni sloj oko čvrstih predmeta i jako ovisi o Schmidtovom broju (omjer kinematičke viskoznost zraka i molekularne difuzivnosti zagađivača u zraku; vidi Gray, 1991). Površinski otpor (R_s) je zapravo skup paralelnih otpora u vezi sa (1) stomama lista (sitni otvori na listu kroz koje se izmjenjuju plinovi), (2) epidermom lista, (3) otporima donjeg svoda (npr. kore, debla itd.) i (4) površinskim tlom, gnojem i vodom (vidi Wesely, 1989).

4.6.5 Mikrometeorološki podmodul

Program UAM-V izračunava brzinu trenja i Monin-Obukovljevu duljinu, potrebne za izračunavanje aerodinamičkog otpora, iz mrežnog unosa vjetra i temperature, na osnovu slične teorije. Pretpostavka je da površinski sloj konstantnog fluxa postoji od površine do srednje visine sloja 1, bez obzira na debljinu sloja 1. Tlak, površinska temperatura i temperatura sloja 1 se koriste da bi se izračunao potencijalni gradijent temperature, koji zajedno s brzinom vjetra u sloju 1 određuje stabilnost. Po Louisovoj formulaciji (1979), stabilnost, brzina vjetra u sloju 1 i neravnost površine se koriste za izračunavanje 10-m vjetra, brzine trenja i Monin-Obukhovljeve duljine za svaku kategoriju upotrebe zemlje. Uzimajući u obzir da namreškanost površine vode ovisi o površinskom stresu, namreškanost vode se preračunava iz brzine trenja za

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	39
		Listova :	83

izračunavanje tri otpora taloženja. Brzina trenja na vodi se unosi u posebnu varijablu radi izračunavanja otpora vodene površine.

4.6.6 Varijacije u upotrebi zemlje na pod mrežnom nivou

Površinska (10 m) brzina vjetra, brzina trenja i Monin-Obukhovljeva duljina za svaku kategoriju upotrebe zemlje unutar mrežnog polja se koriste za izračunavanje aerodinamičkog i graničnog otpora za svaku vrstu upotrebe zemlje u tom polju. Otpori se kombiniraju s površinskim otporom zavisnim od upotrebe zemlje da bi se dobila brzina taloženja zavisna o upotrebi zemlje. Brzine se tada mjere po djelomičnom području koje pokriva svaka vrsta upotrebe zemlje unutar mrežnog polja. Da bi se dobila jedinstvena brzina taloženja za svako mrežno polje za svaku vrstu.

4.6.7 Učinci vodom izazvanog stresa na otpor stoma

Otpor stoma, koji kontrolira dnevno plinovito suho taloženje na obrasle površine u vidu površinskog otpora, znatno se povećava za vrijeme razdoblja vlagom izazvanog stresa. Algoritam taloženja u modelu prepoznaje tri stanja vegetacije za svako mrežno polje; (A) aktivna nenavodnjavana vegetacija u nestresnim uvjetima ili navodnjavana vegetacija; (B) aktivna nenavodnjavana vegetacija u stresnim uvjetima; i (C) neaktivna vegetacija.

U stanju A, otpor stoma je parametriziran u vidu referentnog otpora (zavisno od godišnjeg doba i upotrebe zemlje), sunčeve radijacije i površinske temperature zraka. Sunčani flux se izračunava kao funkcija kuta sunčanog zenita i prilagođava izravno s obzirom na postotak naoblake za svako polje. Korekcijski faktor površinske temperature zraka za otpor stoma je također uključen. Ako su dostupni detaljniji podaci o poljoprivrednoj upotrebi zemlje zajedno sa vrstom usjeva, ta nova korekcija temperature

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 40
		Listova : 83

omogućava jednostavnu implementaciju minimalne, maksimalne i optimalne temperature za zatvaranje stoma ovisno o usjevu. Trenutno su unešene vrijednosti od 0, 40 i 20 °C za minimalnu, maksimalnu i optimalnu temperaturu.

U stanju B, koje odgovara minimalno otvorenim stomama, otpor stoma je proizvoljno podešen da množi otpor iz stanja A. Trenutno je taj faktor podešen na 10; to možda nije odgovarajući množitelj i treba ga razmotriti kada podaci o vlagom izazvanom stresu postanu dostupni modelu. U stanju C, otpor stoma je podešen na vrlo veliku vrijednost (10^4), praktički sprečavajući taloženje na tu kategorije upotrebe zemlje. Za aplikacije u kojima nedostatak podataka ne omogućava ili točno određivanje uvjeta vlagom izazvanog stresa ili razlikovanje navodnjavanje od nenavodnjavane vegetacije, samo se stanje A uzima u obzir.

4.6.8 Taloženje u vodene površine

Taloženje u vodene površine može biti brzo za mnoge topljive plinove, ali očekivano povećanje brzine taloženja u vodu nije dobro predstavljeno Weselyjevim (1989) algoritmom. Stoga je u UAM-V model implementirana formula za površinski otpor vode na osnovi rada Slinna (1978), kakvu je predložio Scire (1991). U tekućoj fazi otpor je

$$R_s = \frac{H}{\alpha^* \cdot k_l}$$

gdje H predstavlja koeficijent Henryjevog zakona, α^* je efektivno poboljšanje topivosti svakog plina u vodi i k_l je brzina prijenosa u tekućoj fazi, koja uključuje učinke površinskog stresa. Slinn (1978) je izrazio k_l pomoću brzine površinskog trenja u_* na vodi kao:

$$k_l = 4,8 \cdot 10^{-4} u_*$$

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	41
		Listova :	83

4.6.9 Učinci površinske vlage

UAM-V algoritam taloženja uključuje modifikacije površinskim otporima za rosom i kišom smočene površine (Wesely, 1989). Razmjer rose se procijenjuje pomoću programa baziranog na odnosu između relativne vlažnosti i brzine vjetra.

Količine kiše, ako su dostupne, se koriste za utvrđivanje vremenskog i prostornog razmjera kišom natopljenog tla. Unosna datoteka koja se koristi za tu svrhu je ista koja se koristi za izračunavanje mokrog taloženja (vidi niže). Ukoliko te datoteke nema, model samo procijenjuje modifikacije površinskog otpora zbog rosom smočenog tla.

4.6.10 Mokro taloženje

UAM-V model sadrži opcionalni algoritam mokrog taloženja koji izračunava uklanjanje aerosola (npr. dim, magla) i vrsta topljivih plinova iz atmosfere tijekom kiše. Unosna datoteka koja sadrži mrežne količine kiše tokom sata, obično na osnovi dostupnih podataka prikupljenih promatranjem, je potrebna za tu opciju. Opcija mokrog taloženja se u pravilu ne koristi za ozonsko modeliranje s obzirom da je kiša neuobičajena tijekom ozonskih epizoda.

4.6.11 Obrađivanje uspona perjanice iz dimnjaka

Obrađivanje uspona dimova iz dimnjaka u UAM-V programu se zasniva na obrađivanju uspona dimova iz dimnjaka razvijenom za Gaussovski model disperzije TUPOS (Turner, 1986). Uspon dimova iz dimnjaka se izračunava iz parametara dimnjaka i mrežnih meteoroloških unosa u UAM-V-u. Rutina izračunava uspon dimova zavisnu od stabilnosti na osnovi, ili uzgona ili fluxa momenta sile (zamaha) za sloj u kojem se

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	42
		Listova :	83

nalazi dimnjak, koji god je jači. Ako uspon dimova prijeđe vrh jednog sloja, uspon dimova se preračunava na osnovu lokalne stabilnosti slijedećeg višeg sloja zajedno sa rezidualnim fluxom uzgona u taj sloj (flux momenta sile se samo ondnosi na sloj u kojem je dimnjak). Kad se ustanovi konačni uspon dimova, rezultati se modificiraju za količinu skretanja zraka s vrha dimnjaka prema dolje ovisnu o Froudeovom broju ako je brzina vjetra veća od 2/3 brzine izlaska iz dimnjaka.

Uspón neutralno-nestabilnog momenta sile ΔH_{um} se određuje iz

$$\Delta H_{um} = \frac{3dv_s}{u}$$

gdje je d promjer dimnjaka (m), v_s je izlazna brzina iz dimnjaka (m/s) i u je brzina vjetra (m/s).

Uspón neutralno-nestabilnog uzgona ΔH_{ub} uzima se kao manji od

$$\Delta H_{ub} = 30(f/u)^{\frac{3}{5}} + z_b \quad (1)$$

$$\Delta H_{ub} = 24(f/u^3)^{\frac{3}{5}} [h_s + 200(f/u^3)]^{\frac{2}{5}} + z_b \quad (2)$$

gdje je h_s fizička visina dimnjaka (m), f je flux uzgona i z_b je vertikalna udaljenost između vrha dimnjaka i visine sloja u kojem se uspon dimova izračunava.

Flux uzgona f se izračunava iz parametara dimnjaka za sloj u kojem se nalazi dimnjak, ali je podešen tako da residualni flux f_r ulazi u dno svakog višeg sloja. Ako uspon dimova iz dimnjaka nadmaši visinu sloja koji se promatra, rezidualni flux u slijedeći viši sloj se izračunava na slijedeći način ovisno koja je jednačba uzgona korištena:

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 43
		Listova : 83

$$f_r = u \left(\frac{\Delta H_{ub} - z_t}{30} \right)^{\frac{5}{3}}$$

$$f_r = 0,0055 \cdot (\Delta H_{ub} - z_t) u^3 \left(1 + \frac{h_s}{\Delta H_{ub} - z_t} \right)^{-\frac{2}{3}}$$

gdje je z_t visina vrha sloja koji sadrži dimove iz dimnjaka u odnosu na vrh dimnjaka.

Stabilni uspon momenta sile se uzima kao manji od ΔH_{um} i količine ΔH_{sm} :

$$\Delta H_{um} = 0,646 \cdot \left(\frac{v_s^2 d^2}{T_s u} \right)^{\frac{1}{3}} T^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)^{-\frac{1}{6}}$$

Pod stabilnim uvjetima podrazumijeva se ujednačeni “cilindar” dima , s dnom “cilindra” na 1/3 visine vrha (i središtem na 2/3 visine) u odnosu na vrh dimnjaka. Stalan uspon uzgona vrha oblaka dima ΔH_t se uzima kao manji od

$$\Delta H_t = \left(\frac{1,8 \cdot f \cdot T}{u \frac{\partial \theta}{\partial z}} + z_b^3 \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\Delta H_t = \left(\frac{4,1 \cdot f \cdot T}{f_0^{1/3} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z}} + z_b^{8/3} \right)^{\frac{3}{8}}$$

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	44
		Listova :	83

gdje je f_o flux uzgona vrha dimnjaka i f može biti ili f_o ili f_r , zavisno od sloja u pitanju. Uspon oblaka dima se uzima kao veći od uspona stabilnog momenta sile i uspona uzgona vrha oblaka dima. Ako se odabere uspon uzgona i izračunati vrh dima iz dimnjaka je iznad vrha sloja u kojem se dim nalazi, rezidualni flux se izračunava iz jednadžbe 3 (ako je korištena jednadžba za uzgon broj 1) ili jednadžbe 4 (ako je korištena jednadžba za uzgon broj 2):

$$f_r = f - 0,56 \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{u}{T} (z_t^3 - z_b^3) \quad (3)$$

$$f_r = f - 0,24 \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{f_0^{1/3}}{T} (z_t^{8/3} - z_b^{8/3}) \quad (4)$$

gdje je f ili f_r iz prijašnjeg sloja ili f_o u sloju koji sadrži dimnjak.

Izračunavanje uspona dima se nastavlja sloj po sloj koristeći odgovarajuće jednadžbe za stabilne i neutralno-nestabilne uvjete sve dok visina uspona dima ne ostane unutar zadanog sloja. To se onda uzima kao konačni uspon dima.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	45
		Listova :	83

4.7 PODMREŽNO OBRAĐIVANJE PERJANICE IZ TOČKASTIH IZVORA

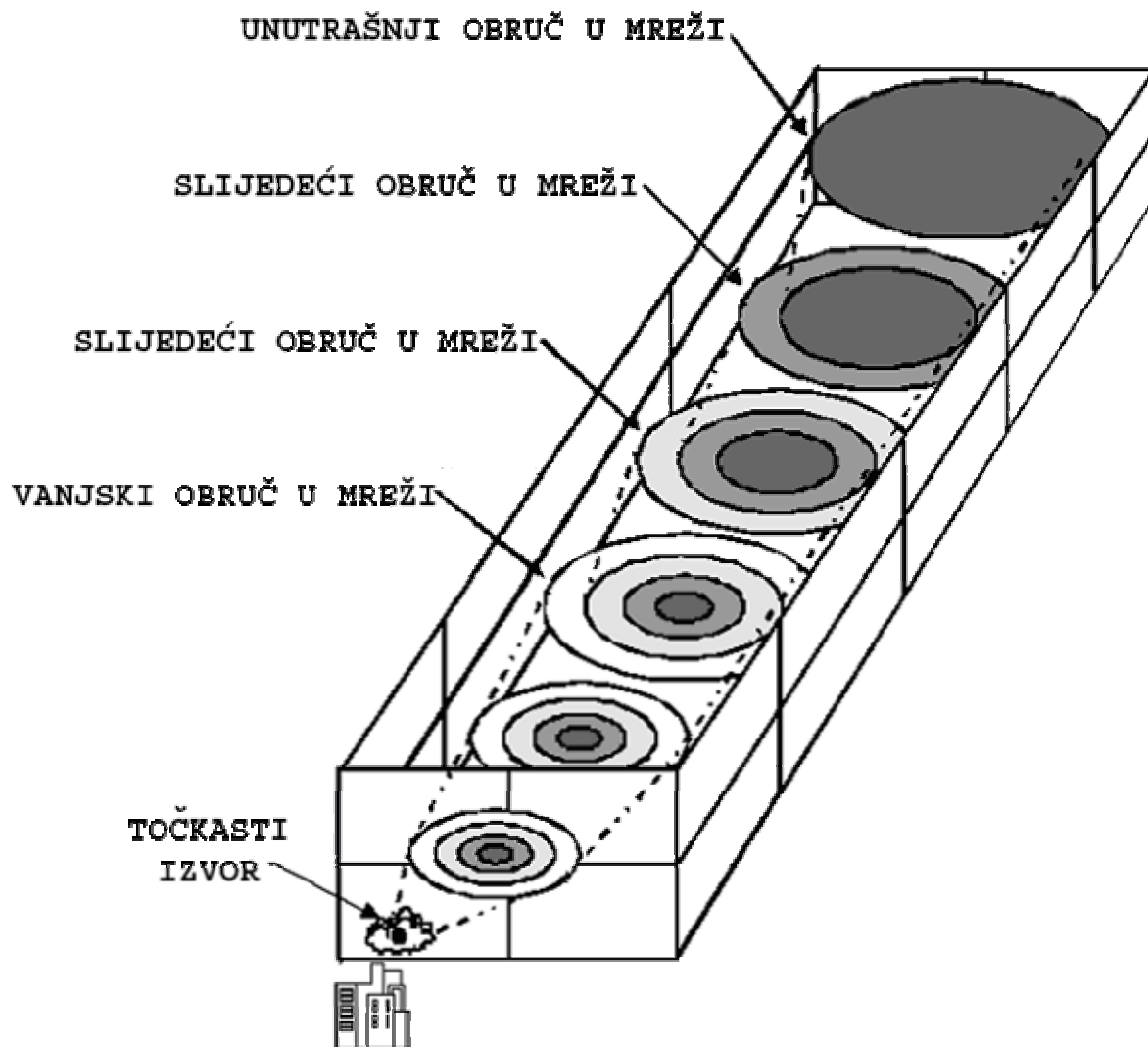
UAM program sadrži “perjanica-u-mreži” (plume-in-grid (PiG)) modul koji omogućava da oblaci dima iz individualnih izvora budu prikazani kao serija diskretnih Gaussovskih dašaka na podmrežnom nivou. PiG modul je potekao iz Reaktivnog Modela Dima (Reactive Plume Model (Morris, 1992c)).

PiG opcija se osobito preporučuje za obrađivanje velikih povišenih izvora NO_x , s obzirom da trenutačna disperzija emisija NO_x unutar mrežnog polja koje sadrži znatnu koncentraciju VOC-a može pridonijeti prevelikom prinosu NO_x -a u produkciji ozona u tom polju.

PiG obrađivanje je shematski prikazano na Slici 8. Svaki dašak je postavljen sa do 10 koncentričnih eliptičnih “reaktičnih polja”. Broj početnih polja bira korisnik. Kako dašci putuju unutar mreže modela, oni “ukrcavaju” okolni zrak iz mrežnih polja koja ih okružuju i prolaze kemijske transformacije. Iako sveki dašak međusobno djeluje s mrežnim poljem u kojem se nalazi, dašci ne djeluju jedan na drugi. Kad su dimenzije daška razmjerne dimenzijama mrežnog polja, materijal daška iz vanjskog polja se “osipa” po modelu mreže. Taj se proces ponavlja dok dašak ne bude eliminiran.

Pod nestabilnim uvjetima dašak može vrlo brzo rasti po vertikali. Da bi se odgovorilo na taj rast, čitava masa daška se ispušta u polje koje sadrži središnju liniju daška ako volumen daška prijeđe jednu polovinu volumena mrežnog polja.

Ako dašak uđe u podpolje sitne mreže iz grublje mreže, masa daška se osipa iz dovoljnog broja reakcijskih polja da bi se veličina daška postala manja od veličine polja sitne mreže. Ako dašak prijeđe iz sitne u grublju mrežu, dašak ostaje čitav dok ne naraste do dimenzija razmjernih gruboj mreži (Slika 8.).



Slika 8. Šematski prikaz obrađivanja perjanice

U svakom pojedinom vremenskom koraku tijekom “tipične” UAM-V aplikacije (obrađujući 10-20 velikih NO_x izvora uz pomoć PiG-a), stotine dašaka se mogu skupiti, posebno tijekom noći kad stabilnost jako ograničava rast oblaka dima. U daščima može ostati visoka koncentracija NO_x na znatne udaljenosti u daljnjem procesu, s malo ili bez proizvodnje ozona unutar daška. Integracija punog CB-IV kemijskog mehanizma u tu numerički “krutu” situaciju oduzima puno vremena i nepotrebna je. Stoga je prisutna jednostavna jednadžba kolebanja (equilibrium) kao opcionalna zamjena potpunih CB-IV

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 47
		Listova : 83

kemijskih reakcija. Ta opcija se može koristiti za svaki podskup PiG-om obrađivanih izvora. Ta metoda koristi modifikaciju jako sažetog i parametriziranog RIVAD kemijskog mehanizma (Morris, 1988). Glavne odlike tog mehanizma su slijedeće:

1. Stabilni (fotostacionarni) kemijski procesi NO_x i O_3 se podrazumijevaju za vrijeme dana; titriranje NO i O_3 se podrazumijevaju za vrijeme noći. Stoga se sav NO u dašku pretvara u NO_2 kad padne noć bez obzira na koncentraciju O_3 i NO_3 .
2. Uključeno je formiranje H_2SO_4 i HNO kroz reakcije SO_2 i NO_2 s radikalom OH za vrijeme dana. Pretpostavka je da je OH u stabilnom stanju s reakcijom H_2O i uzbuđenih pojedinačnih atoma kisika iz fotolize O_3 . Pretpostavljamo da su koncentracije VOC niske.
3. Pretpostavljamo da su NO_3 i N_2O_5 tijekom noći u stabilnom stanju s NO_2 i O_3 . Količina HNO_3 stvorena reakcijom N_2O_5 i H_2O se oduzima izravno od $[\text{NO}_2]$. Dušik se ne sačuva ako na NO_3 i N_2O_5 otpada više od malog postotka ukupnog dušika. Koncentracije NO_3 i N_2O_5 variraju značajno s obzirom na varijacije u nivou koncentracije oksidanata.
4. Količina HNO_3 nastala tokom dana iz reakcija NO_2 sa OH je dedukcirana iz NO_x , a omjer NO_2 i NO je pretpostavljen da je isti kao i izračunati u točki 1.
5. Zadane početne koncentracije NO , NO_2 i O_3 ; i koncentracije mirnog stanja NO , NO_2 , OH , O_3 , NO_3 i N_2O_5 se računaju na početku svakog koraka prije oduzimanja dušika, u smislu da se uključi u računanje HNO_3 .

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	48
		Listova :	83

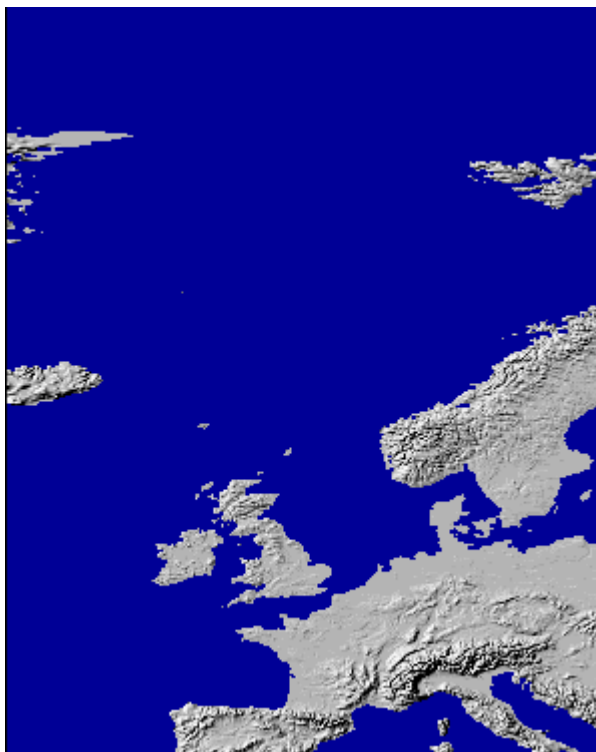
5 PRIPREMA PODATAKA

5.1 POSTUPAK MODELIRANJA U MM5-U

Postupak modeliranja meteoroloških uvijeta u MM5 programu sastoji se od niz pripremnih radnji prije nego se pokrene osnovni program koji simulira meteorološke uvijete u zadanom području.

1. Izrada geografske karte područja simulacije.

Za izradu geografske karte korišten je program TERRAIN, programu se u *terrain.deck* skripti definira interesno područje koje trebamo generirati, navodi mu se putanja do datoteke (*W020N90*) u kojoj se nalaze topografski podaci. Područje koje obuhvaća navedena datoteka prikazano je na slici 9.



Slika 9. Karta ulazne datoteke za program TERRAIN

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	49
		Listova :	83

Područje interesa zadaje se sa centralnom geografskom širinom i dužinom područja. U mome slučaju to je bila Rijeka, geografska dužina i širina Rijeke – Kozala (45° 20' 00"; 14° 27' 00"), veličinom mreže u x i y smjeru i pomakom u oba smjera dx i dy.

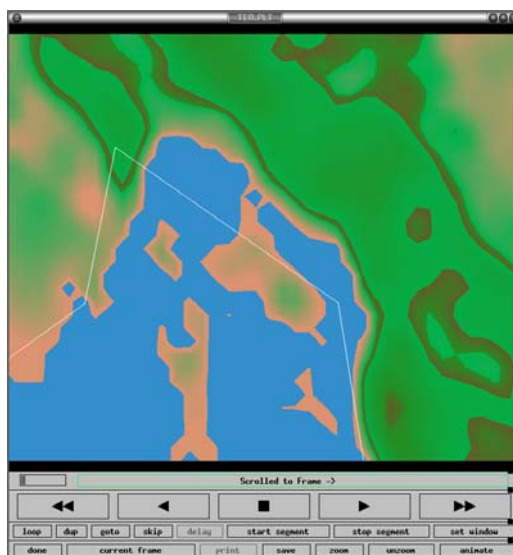
Terrain.deck skripta

```
#!/bin/csh -f
# terrain.csh
#
set echo
#
# Set this if you would like to ftp terrain data
#
#set ftpdata = true
set ftpdata = false
#
# Set the following for ftp'ing 30 sec elevation data from USGS ftp site
#
#set Where30sTer = ftp
set Where30sTer = /home/darije/TERRAIN/Data
if ( $Where30sTer == ftp) then
#
# Use this if you are ftping from other places
#
# set users = Others
#
# Use this if you are ftping from MMM/NCAR
#
# set users = MMM
else
set users =
endif
#
# Uncomment the following line if using the 30 - 100 cm layer soil file
#
# set BotSoil
#
# -----
# 1. Set up parameter statements
# -----
#
cat > src/parame.incl.tmp << EOF
C IIMX,JJMX are the maximum size of the domains, NSIZE = IIMX*JJMX
PARAMETER (IIMX = 200, JJMX = 200, NSIZE = IIMX*JJMX)
EOF
cat > src/paramed.incl.tmp << EOF
C ITRH,JTRH are the maximum size of the terrain data.
C NOBT = ITRH*JTRH, here assuming
C ITRH= 270 ( 45 deg. in north-south direction, 10 min. resolution)
C JTRH= 450 ( 75 deg. in north-south direction, 10 min. resolution)
C NOTE:
C IF USING GLOBAL 30SEC ELEVATION DATASET FROM USGS, NEED TO SET
C BOTH ITRH AND JTRH BIG. TRY THE COMMENTED PARAMETER LINE FIRST.
C THIS WILL REQUIRE APPROXI 0.9 GB MEMORY ON A 32-BIT IEEE MACHINE.
C AN ESTIMATE OF THE DIMENSION SIZE CAN BE MADE FROM Data30s/rdem.out
C AFTER THE FIRST JOB FAILS. USE (XMAXLAT-XMINLAT)*120 TO ESTIMATE
C ITRH, AND (XMAXLON-XMINLON)*120 TO ESTIMATE JTRH.
C
PARAMETER (ITRH = 600, JTRH = 700, NOBT = ITRH*JTRH)
C PARAMETER (ITRH = 1500, JTRH = 1800, NOBT = ITRH*JTRH)
EOF
#
# -----
# 2. Set up NAMELIST
# -----
#
if ( -e terrain.namelist ) rm terrain.namelist
cat > terrain.namelist << EOF
&MAPBG
PHIC = 45.333, ; CENTRAL LATITUDE (minus for southern hemesphere)
XLONC = 14.45, ; CENTRAL LONGITUDE (minus for western hemesphere)
IEXP = .F., ; .T. EXPANDED COARSE DOMAIN, .F. NOT EXPANDED.
; USEFUL IF RUNNING RAWINS/little_r
AEXP = 50., ; APPROX EXPANSION (KM)
IPROJ = 'LAMCON', ; LAMBERT-CONFORMAL MAP PROJECTION
;IPROJ = 'POLSTR', ; POLAR STEREOGRAPHIC MAP PROJECTION
;IPROJ = 'MERCAT', ; MERCATOR MAP PROJECTION
&END
&DOMAINS
;
MAXNES = 1, ; NUMBER OF DOMAINS TO PROCESS
NESTIX = 18, 49, 136, 181, 211, 221, ; GRID DIMENSIONS IN Y DIRECTION
NESTJX = 24, 52, 181, 196, 211, 221, ; GRID DIMENSIONS IN X DIRECTION
DIS = 0.5, 30., 9., 3.0, 1.0, 1.0, ; GRID DISTANCE
NUMNC = 1, 1, 2, 3, 4, 5, ; MOTHER DOMAIN ID
NESTI = 1, 10, 28, 35, 45, 50, ; LOWER LEFT I OF NEST IN MOTHER DOMAIN
NESTJ = 1, 17, 25, 65, 55, 50, ; LOWER LEFT J OF NEST IN MOTHER DOMAIN
RID = 0.5, 1.5, 1.5, 3.1, 2.3, 2.3, ; RADIUS OF INFLUENCE IN GRID UNITS (IFANAL=T)
NTYPE = 6, 3, 4, 6, 6, 6, ; INPUT DATA RESOLUTION
;
; 1: 1 deg (~111 km) global terrain and landuse
```

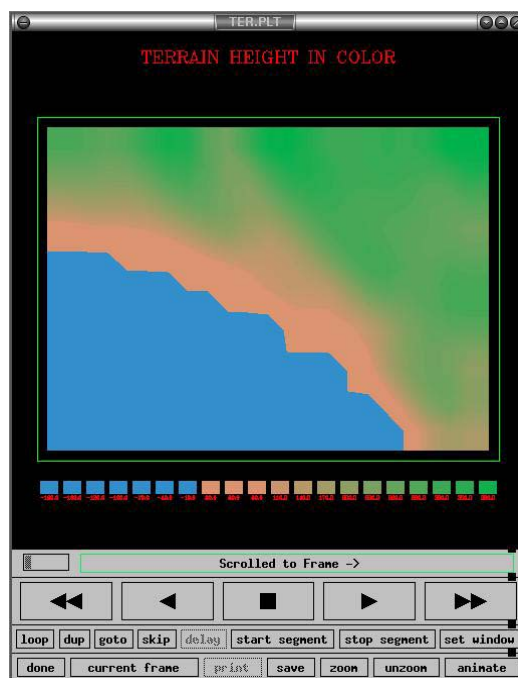
ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	50
		Listova :	83

```
;      2: 30 min ( ~56 km) global terrain and landuse
;      3: 10 min ( ~19 km) global terrain and landuse
;      4: 5 min ( ~9 km) global terrain and landuse
;      5: 2 min ( ~4 km) global terrain and landuse
;      6: 30 sec ( ~.9 km) global terrain and landuse
;
NSTTYP=      1,      2,      2,      2,      2,      2, ; 1 -- ONE WAY NEST, 2 -- TWO WAY NEST
&END
&OPTN
IFTER      = .TRUE., ; .T.-- TERRAIN, .F.-- PLOT DOMAIN MAPS ONLY
IFANAL      = .F., ; .T.-- OBJECTIVE ANALYSIS, .F.-- INTERPOLATION
ISMTHTR      = 2 , ; 1: 1-2-1 smoother, 2: two pass smoother/desmoother
IFEZFUG      = .F., ; .T. USE NCAR GRAPHICS EZMAP WATER BODY INFO TO FUDGE THE LAND USE
; .F. USE LANDWATER MASK DATA
IFFUG      = .F., ; .T. DON'T DO EZFUDGE WITHIN THE USER-SPECIFIED
; LAT/LON BOXES, need to define namelist fudget
IFFUDG      = .F., ; .T. POINT-BY-POINT FUDGING OF LANDUSE,
; need to define namelist fudge
IPRNTD      = .T., ; PRINT OUT LAT. AND LON. ON THE MESH
IPRTH      = .T., ; PRINT OUT ALL PROCESSING FIELDS ON THE MESH
IPRINT      = 1, ; = 1: A LOT MORE PRINT OUTPUT IN terrain.print.out
FIN      = 10., 100., 100., 100., 100., 100., ; CONTOUR INTERVAL (meter) FOR TERRAIN HEIGHT PLOT
;TRUELAT1=91., ; TRUE LATITUDE 1
;TRUELAT2=91., ; TRUE LATITUDE 2, use this if IPROJ='LAMCON'
IFILL      = .TRUE., ; .TRUE. --- color filled plots
LSMDATA      = .FALSE., ; .TRUE. --- Create the data for LSM
VEGTYPE      = 1, ; LANDUSE DATA TYPE: =0: old 13 cat; =1: 24 cat USGS; =2: 16 cat SiB
VSPLOT      = .FALSE., ; .TRUE. --- plot Vege., Soil, Vege. Frc. percentages.
IEXTRA      = .FALSE., ; .TRUE. --- Create extra data for Pleim-Xiu LSM
&END
&FUDGE
; USE ONLY IF IFFUDG = .T., POINT-BY-POINT FUDGING OF LANDUSE,
; IFFUG FOR EACH OF THE NESTS: .F. NO FUDGING, .T. FUDGING
IFFUG      = .F.,.F., ; FUDGE FLAGS
; NDFUG : THE NUMBER OF FUDGING POINTS FOR EACH OF NESTS
NDFUG      = 0,0
; LOCATION (I,J) AND LANDUSE VALUES FOR EACH OF THE NESTS
; NOTE: REGARDLESS OF IFFUG AND NDFUG, 200 VALUES MUST BE GIVEN FOR
; EACH NEST, OR ELSE THE INDEXING WILL GET MESSED UP
; The example below is for two domains. Add more for domain 3 and up
; if needed. Do not remove 0 values for domain 1 and/or 2 even
; they are not used.
;
IFUG(1,1)= 200*0, ; I location for fudge points in domain 1
IFUG(1,2)= 200*0, ; I location for fudge points in domain 2
JFUG(1,1)= 200*0, ; J location for fudge points in domain 1
JFUG(1,2)= 200*0, ; J location for fudge points in domain 2
LNDFUG(1,1)= 200*0, ; land-use value at fudge points for domain 1
LNDFUG(1,2)= 200*0, ; land-use value at fudge points for domain 2
&END
&FUGDET
; USE ONLY IF IFTFUG=.T., WHICH MEANS TERRAIN WON'T DO EZFUDGE WITHIN
; THE USER-SPECIFIED LAT/LON BOXES. THIS OPTION IS USED WHEN THERE
; ARE INLAND BODIES OF WATER THAT ARE DEFINED IN THE LAND USE
; DATA SET BUT NOT IN THE EZMAP DATA SET. THIS OPTION PREVENTS
; THOSE BODIES OF WATER FROM BEING WIPED OUT BY EZFUDGE
NFUGBOX = 2 ; NUMBER OF SUBDOMAINS IN WHICH TO
; TURN OFF EZMAP LAND USE FUDGING
STARTLAT=45.0,44.0, ; LATITUDES OF LOWER-LEFT CORNERS OF SUBDOMAINS
ENDLAT =46.5,45.0, ; LATITUDES OF UPPER-RIGHT CORNERS OF SUBDOMAINS
STARTLON=-95.0,-79.8, ; LONGITUDES OF LOWER-LEFT CORNERS OF SUBDOMAINS
ENDLON =-92.6,-78.5, ; LONGITUDES OF UPPER-RIGHT CORNERS OF SUBDOMAINS
&END
&EZFUDGE
; USE ONLY IF IFEZFUG=.T., WHICH TURNS ON EZMAP WATER BODY FUDGING OF LANDUSE.
; USERS: FEEL FREE TO ADD ANY MORE LAKE SURFACE HEIGHTS THAT YOU'LL NEED.
; HTPS IS THE HEIGHT IN METERS AND THE INDEX OF HTPS CORRESPONDS TO THE ID
; OF THE 'PS' AREA IN THE FILE ezmap_area_ids.
;
HTPS(441) = -.001 ; Oceans -- Do NOT change this one
HTPS(550) = 183. ; Lake Superior
HTPS(587) = 177. ; Lakes Michigan and Huron
HTPS(618) = 176. ; Lake St. Clair
HTPS(613) = 174. ; Lake Erie
HTPS(645) = 75. ; Lake Ontario
HTPS(480) = 1897. ; Lake Tahoe
HTPS(500) = 1281. ; Great Salt Lake
&END
EOF
```

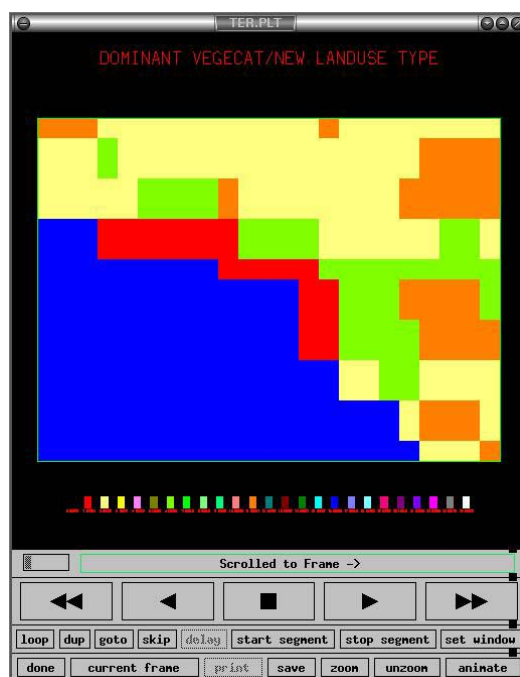
Dobiveni podaci iz programa TERRAIN postprocesirani su u NCARG-ovom programu *idt* .



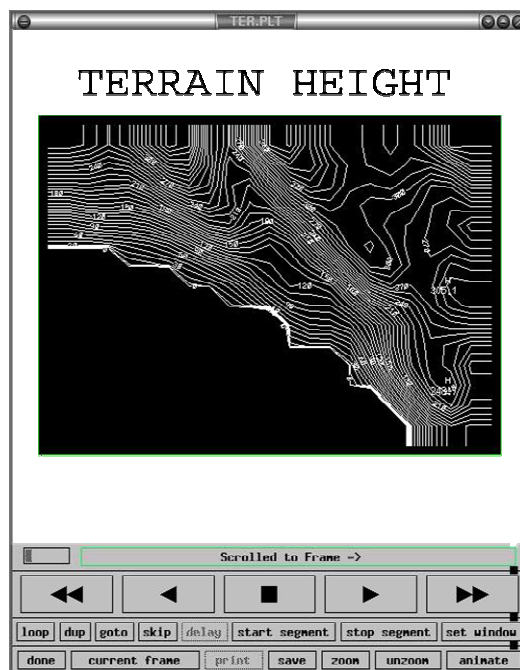
Slika 10. Primjer veće domene dobivene u TERRAIN programu



Slika 11. Domena korištena u simulaciji koncentracije ozona



Slika 12. Iskorištenost tla u zadanoj domeni



Slika 13. Izohipse domene

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	53
		Listova :	83

2. Pripremanje podataka u REGRID i INTERPF programu.

Program REGRID služi za čitanje i pisanje arhiviranih podataka meteorološke analize i prognoze na raznim nivoima tlaka zraka i njihova interpolacija za zadanu domenu izrađenu u programu TERRAIN. Podaci potrebni za program REGRID nije bilo lako naći. Upornošću pretraživanja raznih ftp servera po Americi došao sam do podataka za kolovoz 1999. godine.

3. Pokretanje meteorološke simulacije u MM5-u

Nakon što sam pripremio podatke u gore navedenim programima mogao sam pokrenuti proračun prognoze vremena za svoje područje interesa. U mm5.deck skripti trebaju se definirati razni parametri: dali su uključeni u simulaciju oblaci, PBL, radijacijske sheme, sheme površine zemlje, rubni uvjeti.

```
#!/bin/sh
#
# Version 3 of mm5 job deck
#
# The mm5 executable (mm5.exe) expects to find the following files
# in the Run/ directory:
#   MMINPUT_DOMAIN1 -|
#   BODYOUT_DOMAIN1 | --> output files from Interpf
#   LOWBODY_DOMAIN1 -|
#   TERRAIN_DOMAIN[2,3...] if running nests --> output from Terrain
#
# If it is a restart run:
#   RESTART_DOMAIN1[,2,3...] --> output from MM5 run: renamed from
#                               SAVE_DOMAIN1[,2,3...]
#
# If it is gridded FDDA run with surface analysis nudging:
#   SFCFDDA_DOMAIN1[2,3,...]
#
# If it is observational nudging run:
#   MM5OBS_DOMAIN1[,2,3...] --> user-created observation files
#
# Output from a MM5 run:
#   If IFTAPE = 1
#   MMOUT_DOMAIN1[,2,3...] --> one output for each domain
#   If IFSAVE = TRUE
#   SAVE_DOMAIN1[,2,3...]
#
# temp files should be accessible
umask 022
#
# Select appropriate FDDAsw if doing gridded analysis FDDA
#
#FDDAsw=yes                # gridded FDDA input switch
FDDAsw=no
#
# Sections
# 1. Options for namelist ("mm5lif")
# 2. Running...
#
#-----
# 1. Options for namelist ("mm5lif")
#-----
#
#           The first dimension (column) of the arrays denotes the domain
#           identifier.
#           Col 1 = Domain #1, Col 2 = Dom #2, etc.
#
cat > ./Run/oparam << EOF
&OPARAM
;
; ***** FORECAST TIME AND TIME STEP *****
;
TIMAX = 2880.,          ; forecast length in minutes
```


ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	56
		Listova :	83

```

; DATA DENSITY. OVER LAND, THE STRENGTH OF THE SURFACE-
; ANALYSIS NUDGING IS LINEARLY DECREASED BY 80 PERCENT AT
; THOSE GRID POINTS GREATER THAN RINBLW FROM AN OBSERVATION
; TO ACCOUNT FOR DECREASED CONFIDENCE IN THE ANALYSIS
; IN REGIONS NOT NEAR ANY OBSERVATIONS.
RINBLW=250.,
;
; SET THE NUDGING PRINT FREQUENCY FOR SELECTED DIAGNOSTIC
; PRINTS IN THE GRID (ANALYSIS) NUDGING CODE (IN CGM
; TIMESTEPS)
NPFG=50,
;
; ***** OBSERVATION NUDGING *****
; INDIVIDUAL OBSERVATION NUDGING. VARIABLES THAT ARE ARRAYS
; USE THE FIRST DIMENSION (COLUMN) AS THE DOMAIN IDENTIFIER:
; COLUMN 1 = DOMAIN #1, COLUMN 2 = DOMAIN #2, ETC.
; IS THIS INDIVIDUAL OBSERVATION NUDGING? 0 = NO; 1 = YES
I4DI =0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
; OBS NUDGE THE WIND FIELD FROM STATION DATA? 0 = NO; 1 = YES
ISWIND =1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
; NUDGING COEFFICIENT FOR WINDS FROM STATION DATA
GIV =4.E-4,4.E-4,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
; OBS NUDGE THE TEMPERATURE FIELD FROM STATION DATA? 0 = NO; 1 = YES
ISTEMP=1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
; NUDGING COEFFICIENT FOR TEMPERATURES FROM STATION DATA
GIT =4.E-4,4.E-4,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
; OBS NUDGE THE MIXING RATIO FIELD FROM STATION DATA? 0 = NO; 1 = YES
ISMOIS=1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
; NUDGING COEFFICIENT FOR THE MIXING RATIO FROM STATION DATA
GIQ =4.E-4,4.E-4,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
; THE OBS NUDGING RADIUS OF INFLUENCE IN THE
; HORIZONTAL IN KM FOR CRESSMAN-TYPE DISTANCE-WEIGHTED
; FUNCTIONS WHICH SPREAD THE OBS-NUDGING CORRECTION
; IN THE HORIZONTAL.
RINXY=240.,
; THE OBS NUDGING RADIUS OF INFLUENCE IN THE
; VERTICAL IN SIGMA UNITS FOR CRESSMAN-TYPE DISTANCE-
; WEIGHTED FUNCTIONS WHICH SPREAD THE OBS-NUDGING
; CORRECTION IN THE VERTICAL.
RINSIG=0.001,
; THE HALF-PERIOD OF THE TIME WINDOW, IN MINUTES, OVER
; WHICH AN OBSERVATION WILL AFFECT THE FORECAST VIA OBS
; NUDGING. THAT IS, THE OBS WILL INFLUENCE THE FORECAST
; FROM TIMEOBS-TWINDO TO TIMEOBS+TWINDO. THE TEMPORAL
; WEIGHTING FUNCTION IS DEFINED SUCH THAT THE OBSERVATION
; IS APPLIED WITH FULL STRENGTH WITHIN TWINDO/2. MINUTES
; BEFORE OR AFTER THE OBSERVATION TIME, AND THEN LINEARLY
; DECREASES TO ZERO TWINDO MINUTES BEFORE OR AFTER THE
; OBSERVATION TIME.
TWINDO=40.0,
; THE NUDGING PRINT FREQUENCY FOR SELECTED DIAGNOSTIC PRINT
; IN THE OBS NUDGING CODE (IN CGM TIMESTEPS)
NPFI=20,
; FREQUENCY (IN CGM TIMESTEPS) TO COMPUTE OBS NUDGING WEIGHTS
IONF=2,
IDYNIN=0, ;for dynamic initialization using a ramp-down function to gradually
; turn off the FDDA before the pure forecast, set idynin=1 [y=1, n=0]
DTRAMP=60.,;the time period in minutes over which the
; nudging (obs nudging and analysis nudging) is ramped down
; from one to zero. Set dtramp negative if FDDA is to be ramped
; down BEFORE the end-of-data time (DATEND), and positive if the
; FDDA ramp-down period extends beyond the end-of-data time.
&END
EOF
#
#-----
#
# create namelist: mmlif, and remove comments from namelist:
#
make mmlif
cd ./Run
sed -f ../Util/no.comment.sed mmlif | grep [A-Z,a-z] > mmlif.tmp
mv mmlif.tmp mmlif
rm fparam lparam nparam oparam pparam
#
# copy gridded FDDA files
#
if [ $FDDAsw = yes ]; then
echo "Copy grid fdda file"
for i in MMINPUT_DOMAIN[1-9]
do
Num=`echo $i | grep [1-9]$ | sed 's/.*\(\.\)/\1/'`
cp $i MMINPUT2_DOMAIN$Num
echo "cp $i MMINPUT2_DOMAIN$Num"
done
fi
#
#-----
#
# run MM5
#
date
echo "time mm5.exe >! mm5.print.out "
#time ./mm5.exe > mm5.print.out 2>&1

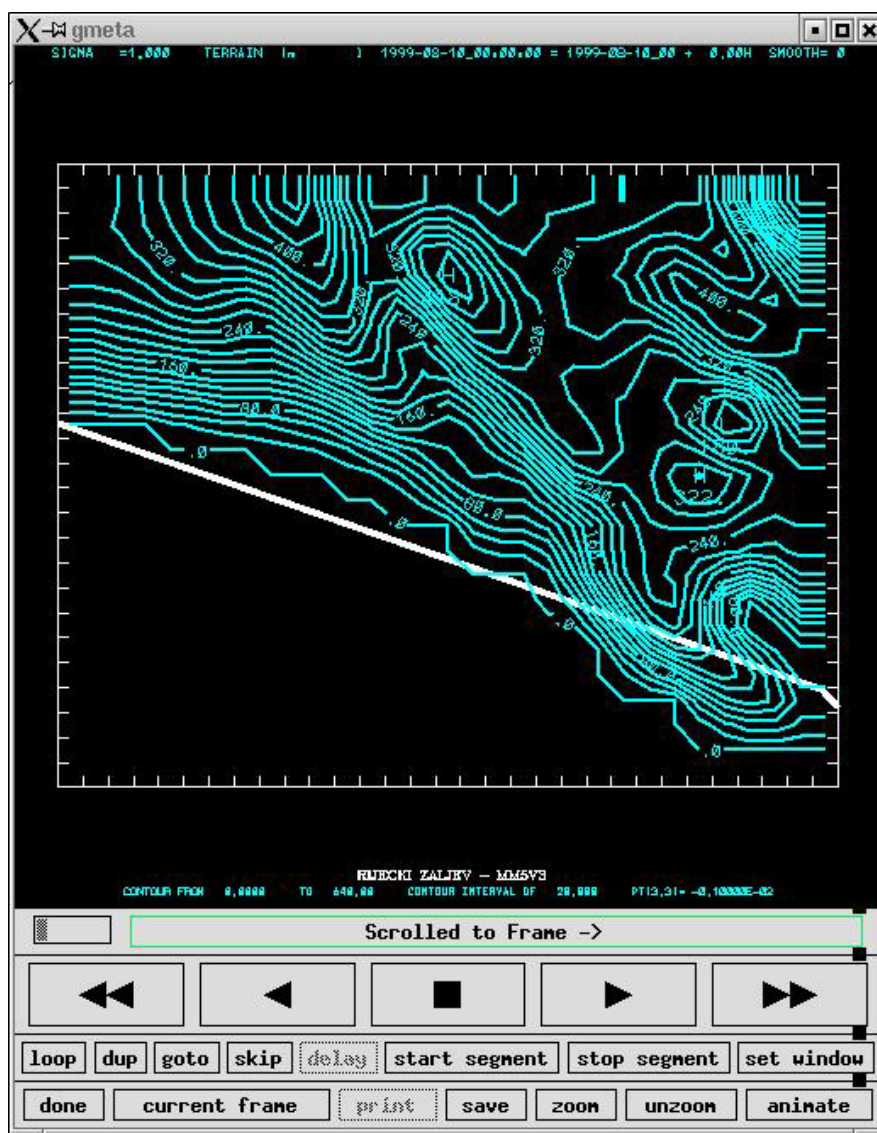
./mm5.exe > mm5.print.out

```

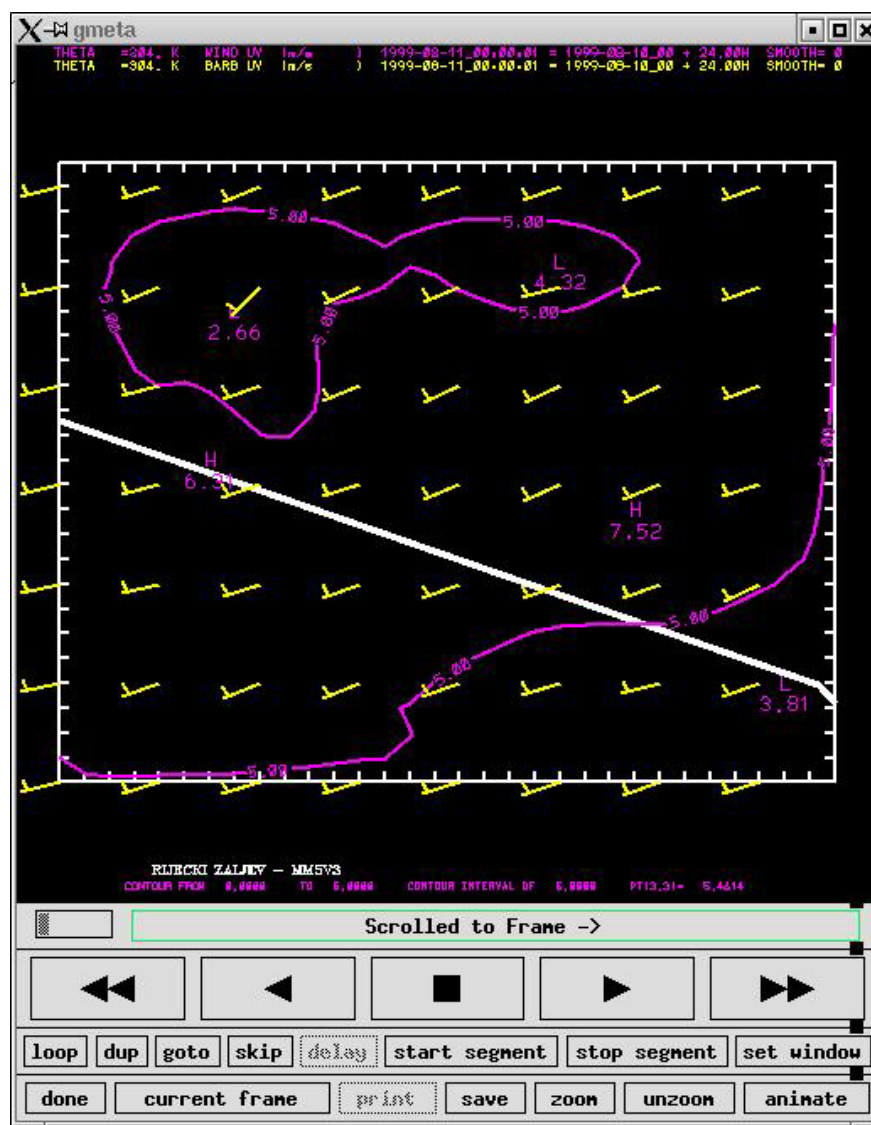
ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	57
		Listova :	83

5.2 GRAFIČKI PRIKAZ DOBIVENIH PODATAKA IZ PROGRAMA MM5

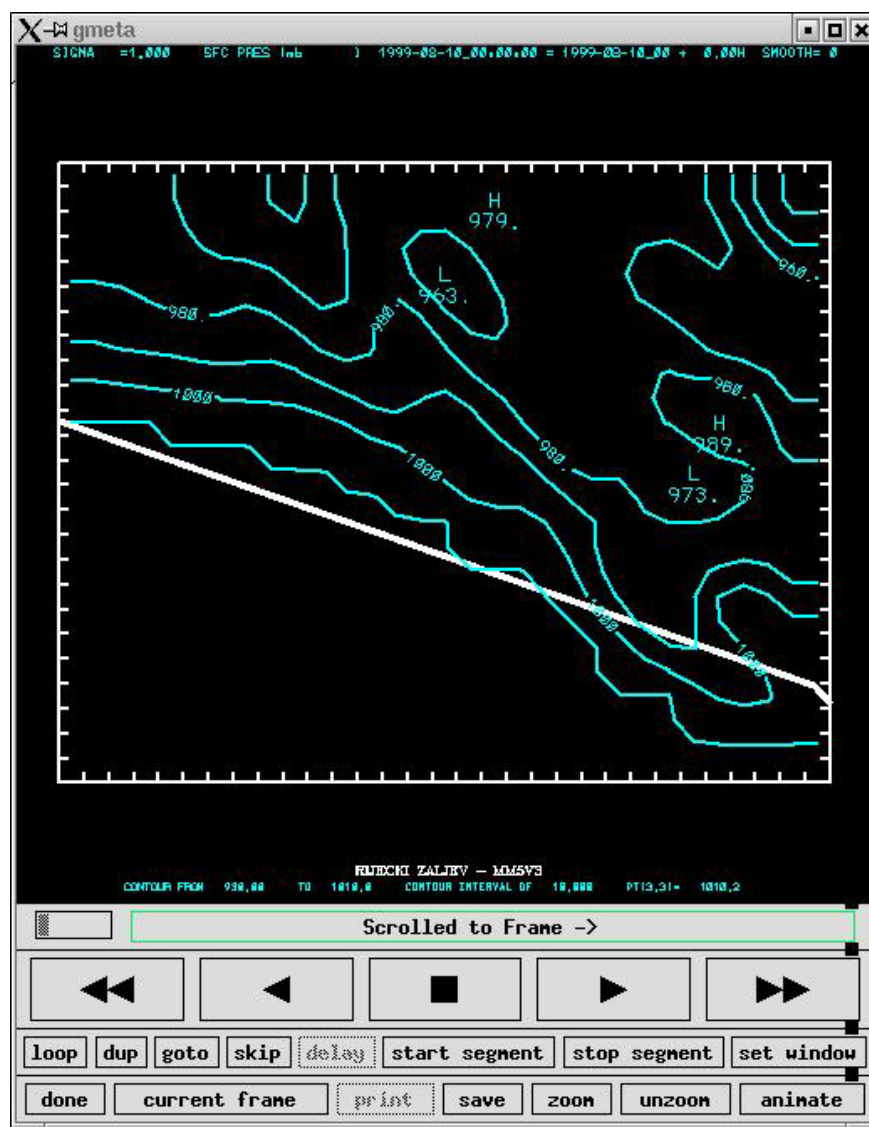
Za prikazivanje dobivenih rezultat u meteorološkoj simulaciji korišteno je više postprocesorskih programa (Vis5d, GRAPH, NCARG itd...).



Slika 14. Izolinije terena



Slika 15. Vektori smjera brzina i vrijednosti brzine = 5m/s



Slika 16. Vrijednosti tlaka u (mbar) za $\sigma=1$

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 60
		Listova : 83

5.3 PRIPREMANJE ULAZNIH PODATAKA ZA PROGRAM UAM-V

Kao što je već rečeno u prijašnjem poglavlju UAM-V program treba za svoj rad imati ulazne podatke o meteorologiji, podatke o terenu, emisijske podatke, podatke na rubovima (rubne uvijete).

Meteorološki podaci su:

- vjetar (x, y – komponenta vjetra u m/s)
- temperaturu (trodimenzionalna matrica temperatura u K)
- vlažnost zraka
- koeficijente vertikalne difuzije
- visine i tlakove na tim visinama

Podaci o terenu:

- mrežnu podjelu pokrivenosti terena (land use)
- topografske visine terena (izohipse terena)

Emisija:

- emisija sa površine terena (mobilna emisija – vozila)
- izdignuta emisija odnosno emisija iz industrijskih dimnjaka

Rubni uvjeti:

- početni uvjeti kvalitete zraka
- koncentracije polutanata u najvišem sloju
- početni uvjeti na stranicama box modela

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	61
		Listova :	83

5.3.1 Podaci o vjetru

Datoteka mora sadržavati podatke horizontalne komponente (u i v) brzine vjetra u svakoj ćeliji za svaki sat simulacije, vjetar određuje kretanje polutanata u zraku. Vertikalna komponenta (w) brzine nije ulazni podatak za model nego se ona računa tijekom same simulacije u samom programu. Datoteka brzina vjetra mora biti zapisana u binarnom obliku da bi ju program UAM-V model mogao koristiti.

Struktura datoteke mora ovako izgledati:

Zaglavlje (header) datoteke:

```
WIND
Rijeka brzine
0      1      0      960618      0.      960618      23.
424.4650 4996.4220 0.5000      0.5000 24 18 8 33
```

Record 1: VRIJEME i DATUM

Record 2: u – komponenta brzine ((U(i,j), i=1,nox), j=1,noy))

Record 3: v – komponenta brzine ((V(i,j), i=1,nox), j=1,noy))

Record 4: brzina vjetra na samoj površini zemlje ((WSURF(i,j), i=1,nox), j=1,noy))

Komponente brzina (u i v) moraju biti zapisane u datoteci za svaki sloj (layer) odnosno n-layer puta moraju biti navedeni.

Zaglavlje svakog fajla ima određenu strukturu, odnosno mora sadržavati ime fajla, vrijeme kada simulacija kreće (sat i datum) i kada završava. U trećem redu header podataka moraju stajati UTM koordinate domene (koordinate donjeg lijevog kuta domene), korak u x i y smjeru (dx, dy), broj polja u x – smjeru, broj polja u y – smjeru, podatak o broju nivoa (layer-a) i podatak u kojoj se UTM zoni nalazimo

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	62
		Listova :	83

5.3.2 Temperatura

Temperaturna datoteka definira apsolutne temperature u (K) za svaku ćeliju mreže za svaki sat simulacije. Apsolutna temperatura upravlja sa nekim kemijskim reakcijama u CB-IV kemijskom mehanizmu. Datoteka mora sadržavati temperature na površini zemlje i temperature u središnjim točkama svake ćelije mreže. Temperature u središnjim točkama moraju biti navedene za sve slojeve.

TEMPERATUR

Rijeka temperature

0	1	0	960618	0.	960618	24.				
451.1640		5015.9900		0.5000	0.5000	18	24	8	33	

5.3.3 Vlažnost zraka

Podaci o vlažnosti zraka sadržavaju koncentraciju vodene pare u djelovima po milionu (ppm) u središnjim točkama ćelije za cijelu domenu i moraju biti navedeni za sve slojeve u kojima će se simulacija odvijati.

H2O

Rijeka humidity

0	1	0	960618	0.	960618	24.				
451.1640		5015.9900		0.5000	0.5000	18	24	8	33	

5.3.4 Koeficijenti vertikalne difuzije

Datoteka definira vertikalne koeficijente difuzije (m^2/s) na vrhu svake ćelije u mrežnom sistemu domene za svaki sat promatranja simulacije. Koeficijenti vertikalne difuzije izračunati su unutar meteorološke simulacije.

VDIFFUSION

Rijeka vert diffusion

0	1	0	960618	0.	960618	24.				
451.1640		5015.9900		0.5000	0.5000	18	24	8	33	

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	63
		Listova :	83

5.3.5 Obrada meteoroloških podataka

Veliki problem je bio pripremiti meteorološke podatke onako kako to program zahtijeva. UAM-V, kao što je već rečeno prihvaća binarne fajlove kao svoj ulazni fajl. Pošto sam ja dobio binarni izlazni fajl iz MM5 procesora nije baš bilo jednostavno konvertirati podatke odnosno pripremiti podatke za UAM-V model. Prvo sam prilagodio jedan pomoćni program koji se nalazi unutar paketa MM5 da bih «otvorio» dobiveni meteorološki model, da bih vidio strukturu datoteke (zapis u ASCII formatu). Nakon više tjednog pokušavanja pripreme podataka za UAM-V uspio sam kontaktirati glavnu osobu (*Belle Hudischewskyj*) zaduženu za MM5 modele u firmi SAI Inc. koja mi je poslala beta verziju njihovog programa (MM52UAMV) koji koriste za pripremanje ulaznih podataka za UAM-V model.

Program koji sam dobio pisan je u programskom jeziku fortran. Pošto je program beta verzija (znači nije još detaljno testirana verzija), nije radio. Program je imao problem sa Y2K (problem 2000 godine) problemom, koji sam otklonio tako da sam radio kompletno novu simulaciju meteorološkog stanja u Riječkom području za godinu 1999., nadalje program je imao ograničenje ako je UTM zona veća od 30, jednostavno ne računa ništa, koji sam uspješno riješio. Kada su sve greške bile uklonjene mogao sam pristupiti konvertiranju podataka. Program je napisan tako da on automatski čita izlaznu datoteku (u binarnom formatu) MM5 programa i zapisuje (u binarnom formatu) meteorološke datoteke za UAM-V.

Program se pokreće preko skripte u kojoj se zadaju koordinate domene (donji lijevi kut promatranog područja u UTM koordinatama), vrijeme odvijanja simulacije i izlazne datoteke.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	64
		Listova :	83

```
#!/bin/csh
# This job is used to convert MM5 fields into UAM-V format.
# MM5 accumulates rain throughout the run. So if this the extraction for the first day
# we don't have accumulated rain saved from the previous day. Hence ioldrn is set equal to 1.
# For subsequent runs, this is changed to "0" because we have a file created from the previous
# day to read from. This is just the way the program is currently set up do deal with rain.
cd /home/fluvent/uam-V/mm52uamv/mm52uam
#
set dateo= (990907)
set date= (990908)
set date2= (990909)
set ioldrn=(1)
foreach i (1)
#
/home/fluvent/uam-V/mm52uamv/mm52uam/mm52uamv.v3 << EOD
Input MM5 file (#1)          |/home/fluvent/uam-V/mm52uamv/MMOUT_DOMAIN1
output UAMV WIND              |output/uamv.wnd.$date[$i]
output UAMV Humid.           |output/uamv.hum.$date[$i]
output UAMV TEMP              |output/uamv.tmp.$date[$i]
output UAMV Z & P             |output/uamv.hgt.$date[$i]
output UAMV Kv                |output/uamv.kvs.$date[$i]
output UAMV Rain              |output/uamv.rain.$date[$i]
output UAMV Rain2             |output/uamv.rain.$date[$i].2300
$ioldrn[$i]
ST & END (YMDH,GMT)          |$date[$i]01,$date2[$i]01
UTM/LAT?(1/0) &zzone         |1,33
xorg,yorg,dx,dy              |451.1640, 5015.9900,0.500,0.500
nx,ny,nk for uamv           |24,18,8
uamv full levels              |50.,100.,200.,350.,500.,750.,1000.,1250.
(1,1)to coarch-mesh          |0 0
divlimit                     |1.e-5
hr2GMT newo calkv d          |500 0 1 1
EOD
end
#=====
```

Izgled skripte korištene za pokretanje porgrama za konvertiranje podataka iz MM5 oblik u oblik prilagođen UAM-V modelu.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 65
		Listova : 83

5.3.6 Ulazni podaci emisija

Točkasta emisija – izvori emisije gdje UAM-V model računa uz pomoć mehanizma dizanja dima. To su izvori emisije iz dimnjaka (elevated point source), model ih ubacuje iznad prvog sloja, na prvom sloju se nalaze emisije sa tla. Datoteka *ptsources* mora sadržavati slijedeće informacije:

- poziciju : - x kordinatu u UTM
 - y kordinatu u UTM
- parametre o pojedinom dimnjaku:
 - visina
 - promjer dimnjaka
 - izlazna temperatura
 - protok
- emisiju : - svakog pojedinog efluenta koji izlazi iz dimnjaka

U simulaciju su uključena dva dimnjaka (tablica 4.):

Dimnjak	UTM (x) (m)	UTM (y)	Visina (m)	D (m)	T (K)	Brzina (m/h)
FCC	456164	5015990	124	4,1	616	0.3630000E+05
G4+G5	463864	5015393	35	2,616	473	0.1228000E+06

Tablica 4. Podaci o dimnjacima korištenim u simulaciji

Emisija sa tla – u simulaciji je korištena samo emisija iz automobila. Inače može se koristiti emisija iz individualnih ne-točkastih izvora sa zemlje i površinska emisija efluenata. U ovu emisiju ulaze antropogeni i prirodni izvori emisije.

Za podatke o prometu koristio sam elaborat «Brojanje prometa na području grada Rijeke 1998. godine». Podaci o prometu su srednja vrijednost vrijednosti iz elaborata,

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 66
		Listova : 83

zato jer u elaboratu su navedeni neki dani, dani kad se promet u gradu Rijeci brojao, tako da nisu baš stvarne vrijednosti stanja.

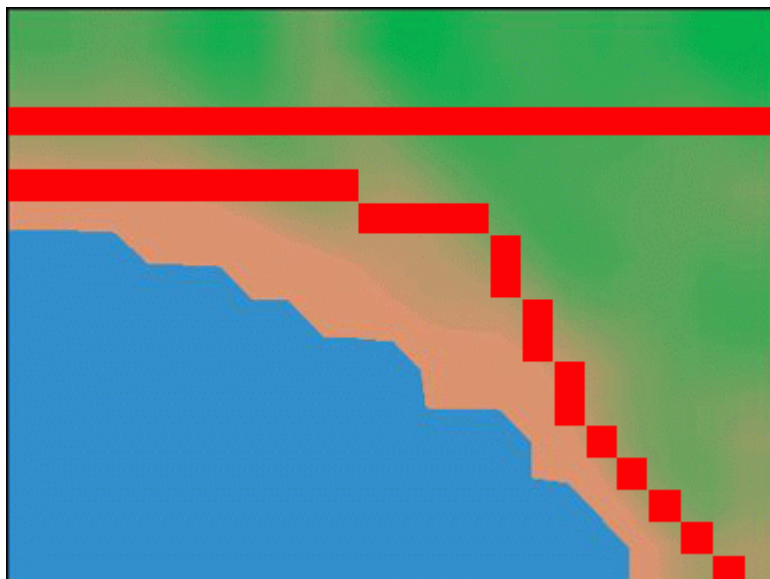
Uzete su prosječne slijedeće vrijednosti (tablica 5.):

sat	Broj auta	prosječno auta na 500 m	NO (ppm)	NO ₂ (ppm)	CO (ppm)
0	405	2,232758145	2232,758145	66,98274436	1979,786648
1	700	3,859088153	3859,088153	115,7726446	3421,853465
2	555	3,059705607	3059,705607	91,7911682	2713,040961
3	800	4,41038646	4410,38646	132,3115938	3910,689674
4	2000	11,02596615	11025,96615	330,7789845	9776,724185
5	3568	19,67032361	19670,32361	590,1097084	17441,67595
6	7889	43,49192348	43491,92348	1304,757704	38564,28855
7	10599	58,43210761	58432,10761	1752,963228	51811,74982
8	18139	100	100000	3000	88670
9	14750	81,31650036	81316,50036	2439,495011	72103,34087
10	14412	79,45311208	79453,11208	2383,593362	70451,07448
11	14846	81,84574673	81845,74673	2455,372402	72572,62363
12	15045	82,94283037	82942,83037	2488,284911	73545,40769
13	15497	85,43469872	85434,69872	2563,040961	75754,94735
14	15958	87,97618391	87976,18391	2639,285517	78008,48228
15	15930	87,82182039	87821,82039	2634,654612	77871,60814
16	17686	97,50261867	97502,61867	2925,07856	86455,57197
17	17009	93,77032913	93770,32913	2813,109874	83146,15084
18	13335	73,51562931	73515,62931	2205,468879	65186,30851
19	14702	81,05187717	81051,87717	2431,556315	71868,69949
20	13898	76,61943878	76619,43878	2298,583163	67938,45636
21	11205	61,77297536	61772,97536	1853,189261	54774,09725
22	2201	12,13407575	12134,07575	364,0222725	10759,28497
23	1823	10,05016815	10050,16815	301,5050444	8911,484095
24	450	2,480842384	2480,842384	74,42527151	2199,762942

Tablica 5. Broj auta u određenom satu i njihova emisija

U tablici vidimo koliko prosječno ima vozila na Riječkim prometnicama u određenom satu, također u tablici vidimo koliko je prosječno vozila na cesti na 500 m. Gledamo na 500 m zato jer je raster domene simulacije 500 m tako da se onda podaci za emisiju sa tla tako unose. U zadnja tri stupca imamo vrijednosti (ppm) za emisiju iz vozila i to za NO, NO₂, CO.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	67
		Listova :	83



Slika 15. Prikaz rute ceste korištene u UAM-V simulaciji

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	68
		Listova :	83

5.3.7 Rubni uvjeti

Za kreiranje datoteka koje sadržavaju podatke o rubnim uvjetima korišten je preprocesor (UAMVICBC). Program se pokreće preko skripti. Skripta za početne uvjete zraka sadržava podatke o broju i nazivu elemenata koji se nalaze u zraku, podatke o domeni (UTM koordinate), vrijeme za koje vrijede podaci. Koncentracije efluenata u zraku satvili smo na minimalne zato jer nisam imao dostup stvarnim vrijednostima koncentracija.

```

CONTROL
AIRQUALITY
INITIAL CONDITIONS Default values
17 0 0 1 200 1
20 1 0
0 0 1 0 0 0
0 0 1 1 0 0
0 0 0 0 0 0
NO
NO2
O3
OLE
PAR
TOL
XYL
HCHO
ACET
ETH
PAN
CO
HNO2
H2O2
HNO3
ISOP
NXOY
96100 0000 96300 2400
END
REGION
0. 0. 33
424465. 4996422.
500.0 500.0
72 96 8
0 0 0. 0. 0.
END
UNITS
NO PPB
NO2 PPB
O3 PPB
OLE PPB
PAR PPB
TOL PPB
XYL PPB
HCHO PPB
ACET PPB
ETH PPB
PAN PPB
CO PPB
HNO2 PPB
H2O2 PPB
HNO3 PPB
ISOP PPB
NXOY PPB
END
TIME INTERVAL
96100 0000 96300 2400
SUBREGION
A 1 1 -1
END
METHOD
ALL ALL CONSTANT 0. 10000. 0
END
VERTICAL METHOD
ALL ALL CONSTANT 0. 10000.
END

CONSTANTS
ALL NO 0.00000000
ALL NO2 1.00000000
ALL O3 40.00000000
ALL OLE 0.30000000
ALL PAR 14.94000000
ALL TOL 0.18000000
ALL XYL 0.09750000
ALL HCHO 2.10000000
ALL ACET 0.55500000
ALL ETH 0.51000000
ALL PAN 0.01000000
ALL CO 200.000000
ALL HNO2 0.01000000
ALL H2O2 0.01000000
ALL HNO3 0.01000000
ALL ISOP 0.02000000
ALL NXOY 0.01000000
END
ENDTIME

```

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 69
		Listova : 83

Početni uvjeti na rubu domene također su napravljeni uz pomoć programa UAMVICBC, skripta ima oblik:

```

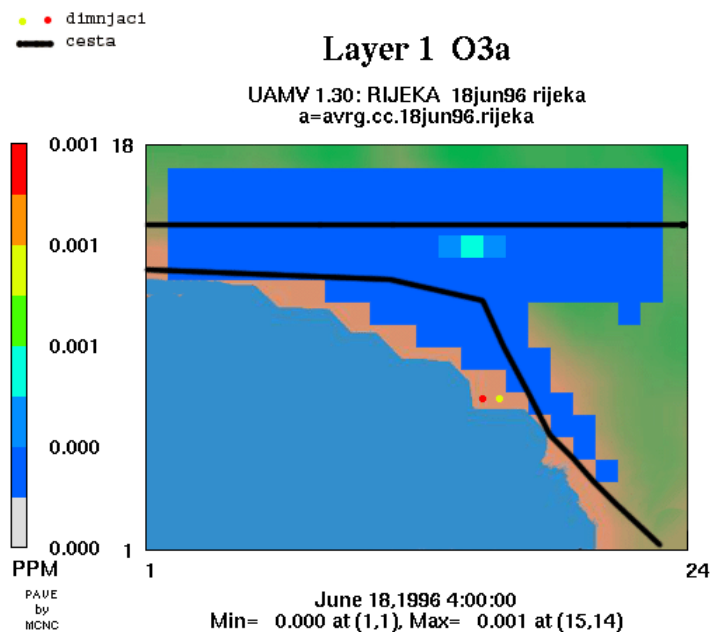
CONTROL
BOUNDARY
Clean boundaries everywhere
17 0 4 0 0 1
20 1 0 0 0 0
0 0 1 0 0 0
0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0
NO
NO2
O3
OLE
PAR
TOL
XYL
HCHO
ACET
ETH
PAN
CO
HNO2
H2O2
HNO3
ISOP
NXOY
96100 0000 96300 2400
END
REGION
0. 0. 33
424465. 4996422.
500.0 500.0
72 96 8
0 0 0. 0. 0.
END
UNITS
NO PPB
NO2 PPB
O3 PPB
OLE PPB
PAR PPB
TOL PPB
XYL PPB
HCHO PPB
ACET PPB
ETH PPB
PAN PPB
CO PPB
HNO2 PPB
H2O2 PPB
HNO3 PPB
ISOP PPB
NXOY PPB
END
BOUNDARIES
WEST 425215. 4997172. 425215. 5043672.
EAST 459715. 4997172. 459715. 5043672.
SOUTH 425215. 4997172. 459715. 4997172.
NORTH 425215. 5043672. 459715. 5043672.
END
TIME INTERVAL
96100 0000 96300 2400
METHOD
ALL ALL BOUNDVALUE 0.0 100000.
END
VERTICAL METHOD
ALL ALL CONSTANT 0.000 100000.
END
BOUNDARYREADINGS
ALL NO 0.00000000
ALL NO2 1.00000000
ALL O3 40.00000000
ALL OLE 0.30000000
ALL PAR 14.94000000
ALL TOL 0.18000000
ALL XYL 0.09750000
ALL HCHO 2.10000000
ALL ACET 0.55500000
ALL ETH 0.51000000
ALL PAN 0.01000000
ALL CO 200.000000
ALL HNO2 0.01000000
ALL H2O2 0.01000000
ALL HNO3 0.01000000
ALL ISOP 0.02000000
ALL NXOY 0.01000000
END
ENDTIME

```

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	70
		Listova :	83

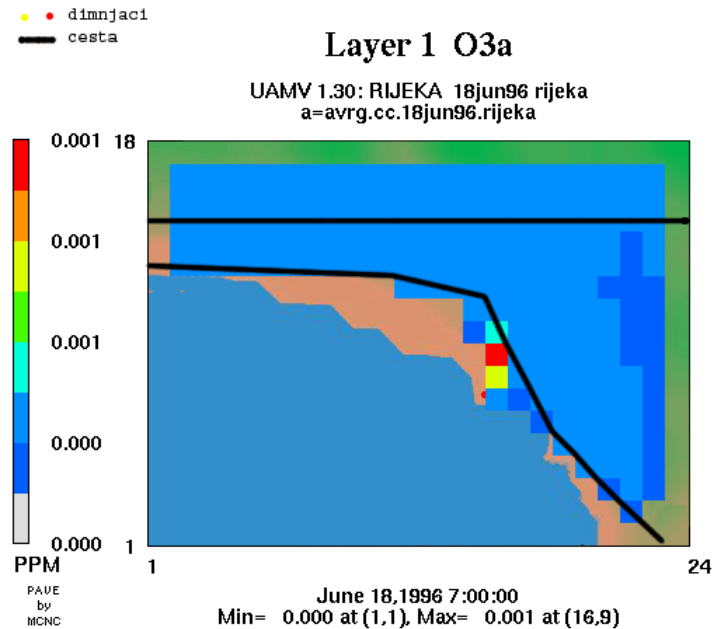
6 REZULTATI SIMULACIJE

Prikazat ćemo po satu osrednjene koncentracije ozona u prizemnom sloju za tri dana simulacije u kritičnim satima.

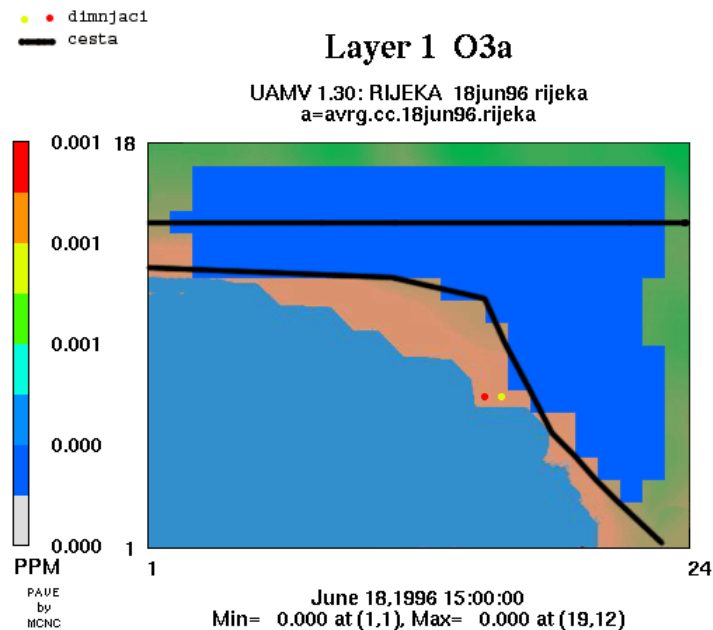


Slika 16. Koncentracija ozona za prvi dan u 4:00 sat ujutro

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	71
		Listova :	83



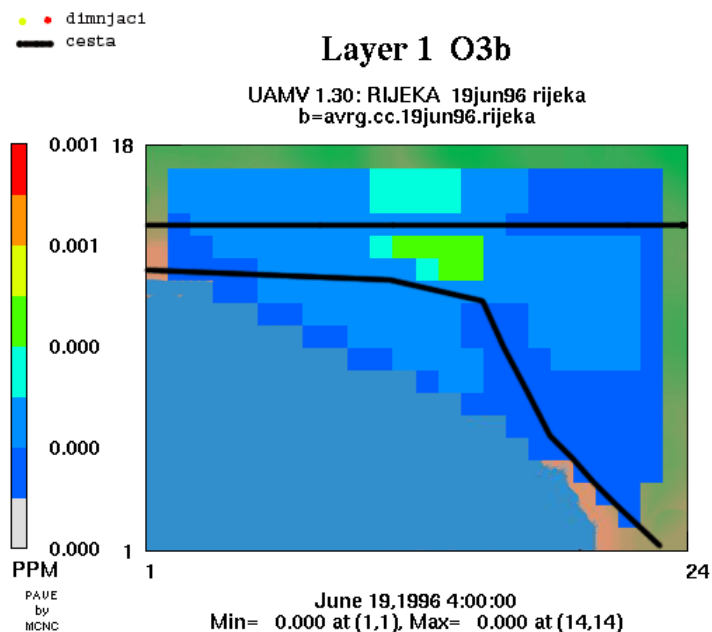
Slika 17.
Koncentracija ozona za prvi dan u 7:00 sat ujutro



Slika 18.
Koncentracija ozona za prvi dan u 15:00 sati

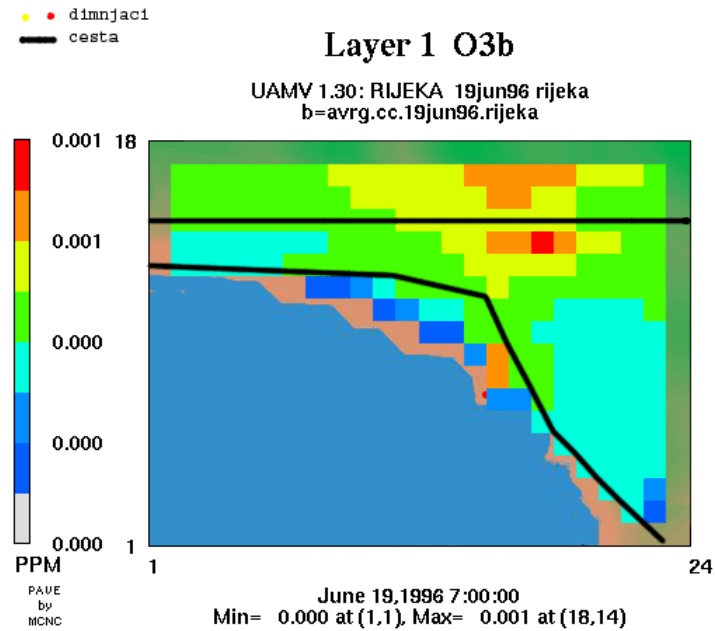
ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	72
		Listova :	83

Iz prijašnjih slika odnosno dobivenih rezultata, vidimo da je koncentracija ozon najveća u jutarnjim satima. U drugom danu scenarija u simulaciju su uključeni točkasti izvori, odnosno dva dimnjaka, dok u prvom danu smo imali samo emisiju iz automobila ka izvor zagađenja.

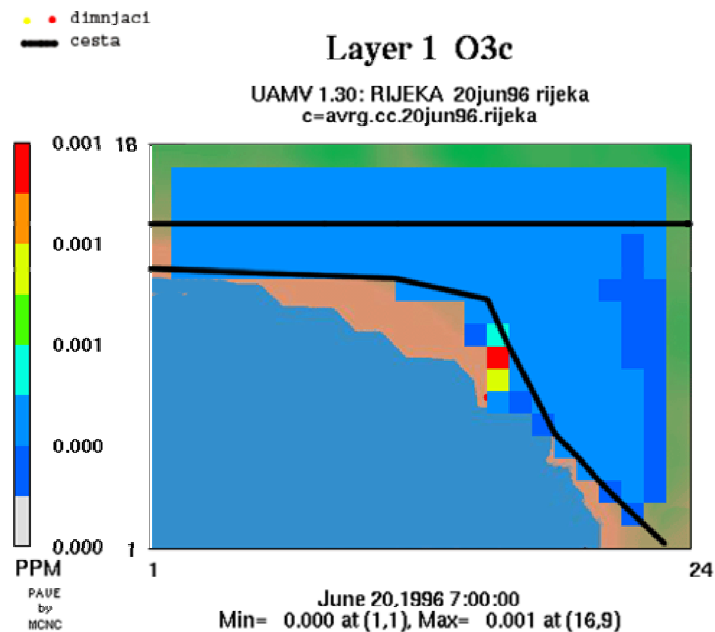


Slika 19. Koncetracije ozona u jutarnjim satima drugog dana scenarija

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	73
		Listova :	83

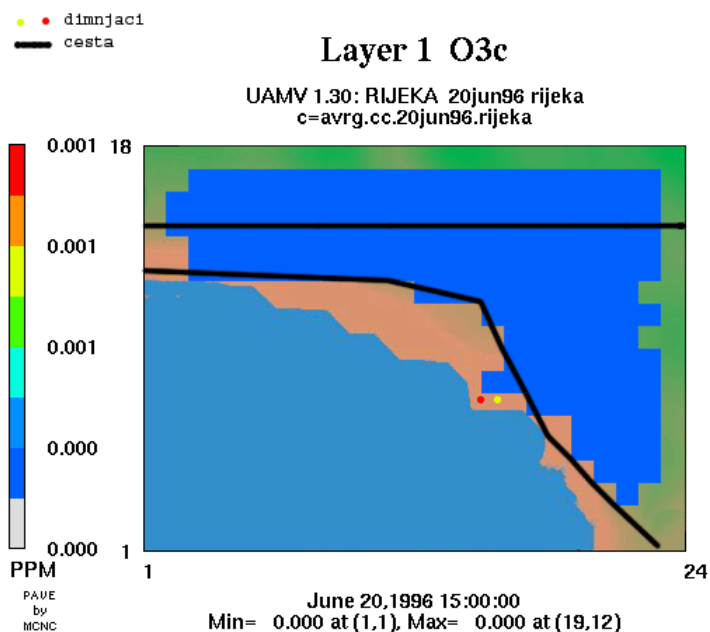


Slika 20. Koncentracije ozona u jutarnjim satima drugog dana scenarija



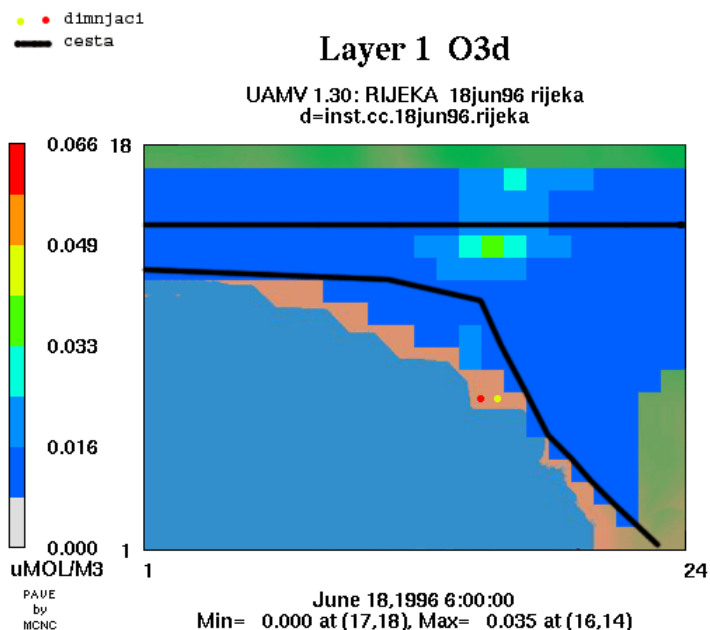
Slika 21. Koncentracije ozona u jutarnjim satima trećeg dana scenarija

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	74
		Listova :	83

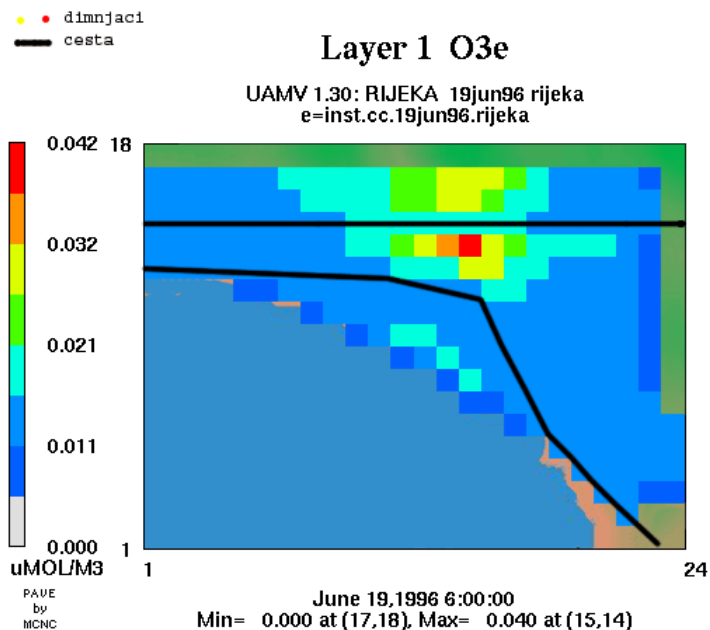


Slika 22. Koncentracije ozona trećeg dana scenarija

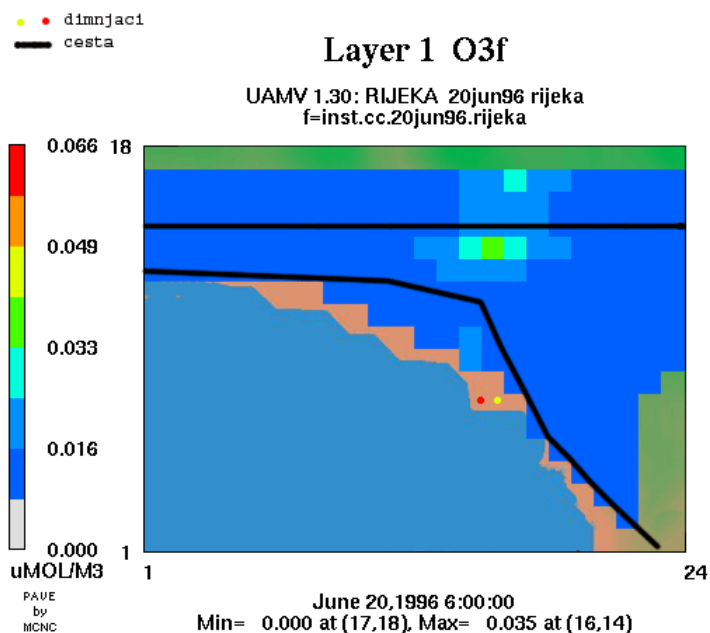
Na slijedećim slikama vidjet ćemo trenutne koncentracije ozona, ugljičnog monoksida i dušičnog monoksida u mikromolima po kubnom metru ($\mu\text{mol}/\text{m}^3$).



Slika 23. Najveća koncentracija u 6 satu prvog dana u točki (16,14) = $0,035 \mu\text{mol}/\text{m}^3$

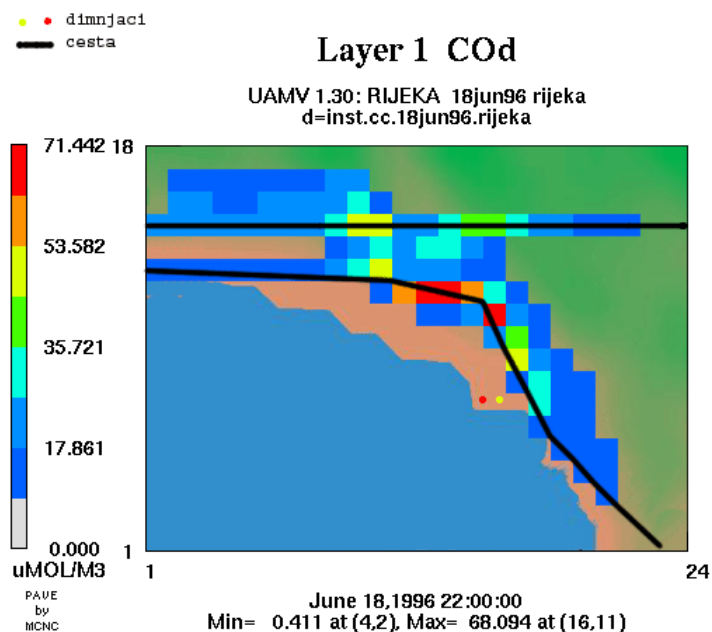


Slika 24. Najveća koncentracija ozona u točki (15,14)



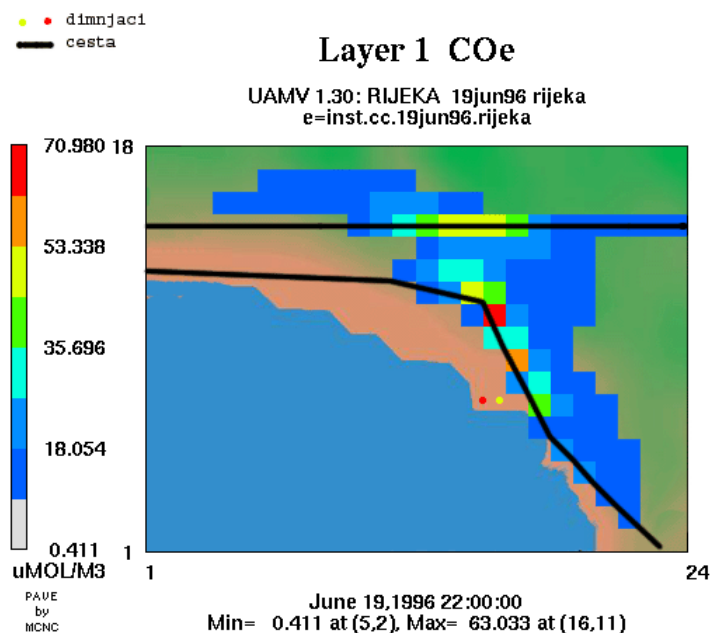
Slika 25. Trenutne koncentracije ozona u 6 satu trećeg dana scenarija

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	76
		Listova :	83

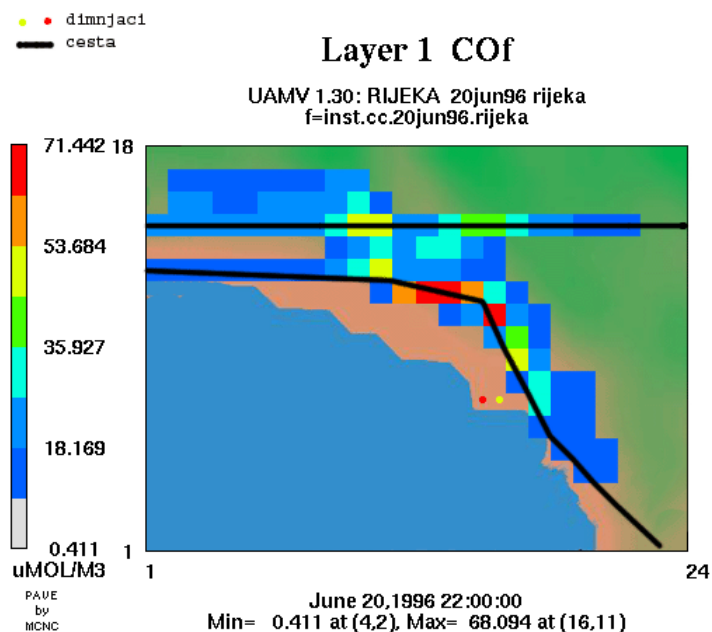


Slika 26. Koncentracija CO u prvom danu 22 sata

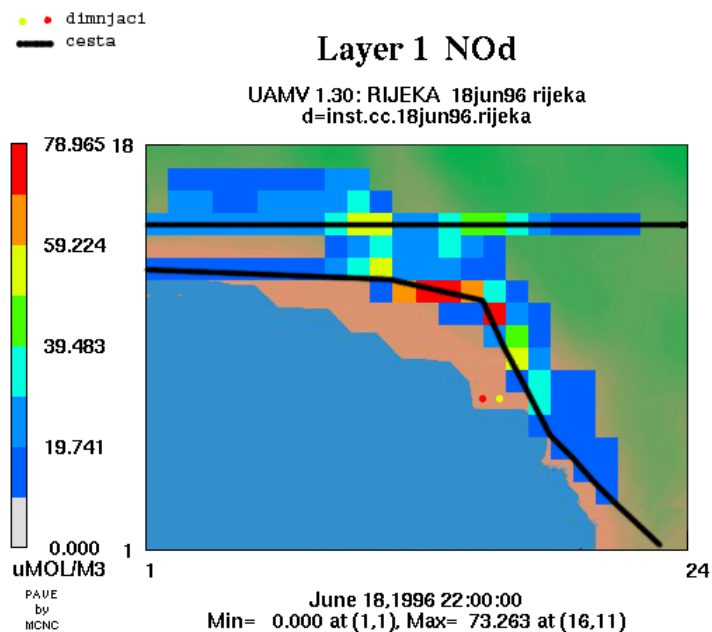
Iz slike vidimo da je najveća koncentracija u datom trenutku (u 22 sata prvog dana) bila baš na području gdje prolazi glavna prometnica.



Slika 27. Koncentracije CO u drugom danu

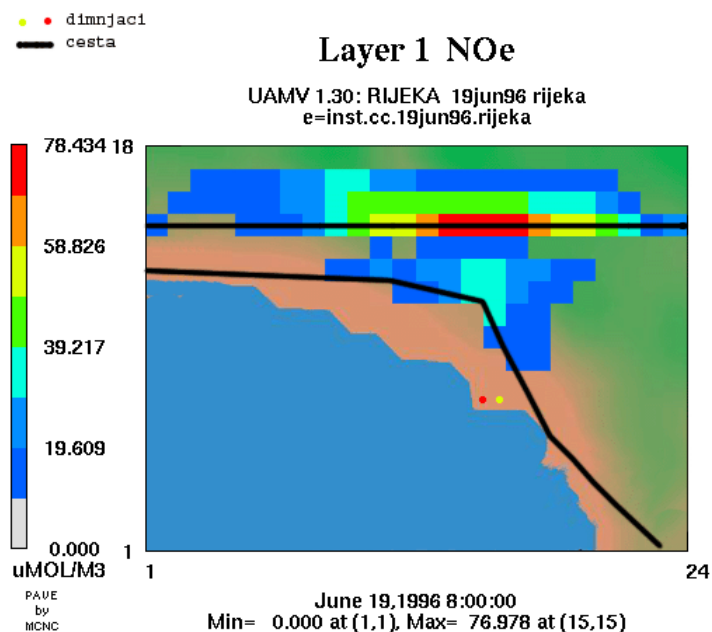


Slika 28. Najveće koncentracije CO-a na području gdje prolazi cesta

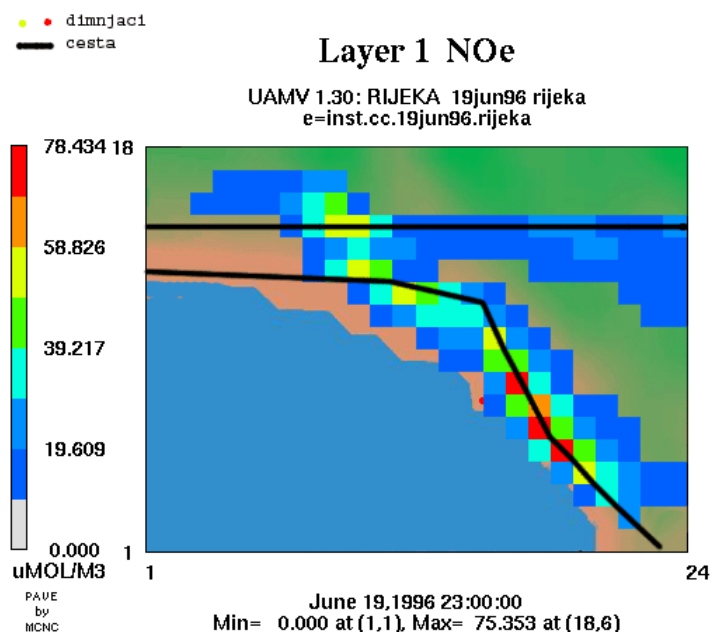


Slika 29. Koncentracije NO u prvom danu u 22:00 sata

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	78
		Listova :	83



Slika 30. Koncentracije NO u drugom danu u 8:00 sati



Slika 31. Koncentracije NO-a se protežu u području cestovnih pravaca

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 79
		Listova : 83

Na temelju prikazanih slika dobivenih simulacijom koncentracije ozona može se konstatirati da koncentracije ozona su veće u jutarnjim satima (do podne) kada je sunčano zračenje najjače i pospješuje kemijske reakcije stvaranja ozona u nižim slojevima troposfere. Dok za koncentracije ugljičnog i dušičnog monoksida ne vrijedi isto. Njihove koncentracije su veće u popodnevnim satima i protežu se pretežno u području gdje su glavne prometnice.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	80
		Listova :	83

7 ZAKLJUČAK

Ovu vrlo izazovnu temu popratile su teškoće u oskudnom izvoru podataka, pa je tempo i obrada ovog zadatka iz tih razloga zahtijevala relativno duže vrijeme.

Danas, u svakom industrijskom gradu postoji problem zagađenosti zraka tako i u gradu Rijeci. Ovim diplomskim radom htjelo se vidjeti kolike su koncentracije ozona i drugih polutanata u zraku. Rezultati su pokazali da su onečišćenja ispod granice dozvoljenog. Dozvoljena granica koncentracije polutanata odnosno kvalitete zraka propisane su na temelju članka 22. Zakona o zaštiti zraka («Narodne novine», broj 48/95), Uredba o preporučenim i graničnim vrijednostima kakvoće zraka. Zakonom o zaštiti zraka točno su određene mjere, način organiziranja i obavljanja zaštite te poboljšanja kakvoće zraka kao dijela okoliša. Navedene se aktivnosti u prvom redu obavljaju radi očuvanja zdravlja ljudi, biljnog i životinjskog svijeta, kulturnih i materijalnih vrijednosti, sprečavanja ili barem smanjivanja onečišćenja koja utječu na promjenu klime, kao i uspostavljanja, održavanja i unapređivanja cjelovitog sustava upravljanja kakvoćom zraka na teritoriju cijele države. Zakon obvezuje državu i jedinice lokalne samouprave te one koji zrak onečišćuju na mjerenje i upravljanje kakvoćom zraka.

Zbog gore navedenih razloga proces praćenja koncentracije ozona trebalo bi automatizirati, tako da se skupljaju podaci o kvaliteti zraka, emisijama polutanata, gustoći prometa na jednom mjestu (serveru koji bi prikupljao podatke). Veliki industrijski kompleksi (INA, TE Rijeka i ostali) bi trebali svoje izmjerene količine efluenata dati na raspolaganje (Uredu za zaštitu okoliša, fakultetu ili sl. ustanovi) da se tamo obrade i iskoriste u daljnjim simulacijama ozona u Riječkom području, naravno vrlo bitnu stvar predstavljaju i podaci o gustoći prometa na cestama koje bi isto trebalo osigurati. Također bi se trebao omogućiti stalan pristup meteorološkim bazama podataka, od kuda bi se on-line preuzimala meteorološka stanja u području koja su potrebna za samu simulaciju.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List : 81
		Listova : 83

Svima je dobro znano da zdravlje ljudi može biti narušeno ne samo zbog prirodnog naslijeđa kojim se na potomke genetski prenose predispozicije za nastanak određenih bolesti, već i stoga što su tijekom života izloženi štetnim utjecajima različitih onečišćujućih tvari iz životnog okruženja. Kakvoća zraka koji udišemo, vode koju pijemo, mora u kojemu se kupamo, hrane koju konzumiramo, tla na kojem uzgajamo biljke i hranimo korisne životinje, te stanje brojnih drugih okolišnih medija, u značajnoj mjeri utječe na razvitak i pojavu brojnih bolesti.

Živimo sa ozonom svakodnevno. On štiti život
na Zemlji ili mu šteti, ali mi imamo snagu da mijenjamo utjecaj
ozona na život, načinom kojim živimo.

(EPA)

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	82
		Listova :	83

8 LITERATURA

1. UAM-V User's guide to the variable-grid urban airshed model, Systems Applications International, Inc., 1999. god.
2. User's guide Preprocessors for preparation of UAM-V initial and boundary concentration data files, Systems Applications International, Inc., 1996. god.
3. User's guide for the UAM/UAM-V boundary condition extraction program, Systems Applications International, Inc., 1996. god.
4. User's manual for variable grid UAM (UAM-V) preprocessor and utility programs, Systems Applications International, Inc., 1997. god.
5. PSU/NCAR Mesoscale Modeling System Tutorial Class Notes and User's Guide: MM5 Modeling System Version 3, National Center for Atmospheric Research, 2002. god.
6. Elaborat: Brojanje prometa na području grada Rijeke 1998 godine, IGH, 1998. god.
7. de Nevers, Noel, Air pollution control engineering, McGraw-Hill, Inc., 1995. god.
8. Press, William H., Teukolsky, Saul A., Vetterling, William T. , Flannery, Brian P., Numerical Recipes in Fortran 90, Press Syndicate of the University of Cambridge, 1996. god.
9. Bujas, Željko, Veliki hrvatsko - engleski riječnik, drugo izdanje, Nakladni zavod Globus, 2001. god.
10. Tehnička Enciklopedija 8 (Meh-Mos) str. 112-137, Jugoslavenski leksikografski zavod, Zagreb, 1982. god.
11. Benson, Morton, Englesko – hrvatski riječnik, Zagreb, 1986 god.

ZAVOD ZA TEH. MEH. I RAČ. INŽ.	DIPLOMSKI RAD	List :	83
		Listova :	83

9 PRILOZI

1. Trodnevni scenario simulacije ozona, osrednjen po satu u prvom layeru (animacija)
2. Trodnevni scenario simulacije trenutnih koncentracija ozona u prvom layeru (animacija)