

SPIS TREŚCI

1. Wstęp	7
2. Modele prognozowania jakości powietrza nowej generacji	10
2.1. Aktualny stan wiedzy	10
2.2. Przykładowe rozwiązania AQMS nowej generacji	15
2.2.1. Architektura systemu	15
2.2.2. Podsystem transportu substancji chemicznych	17
2.2.3. Mechanizmy chemiczne	19
2.2.4. Biblioteki parametrów fizyczno-chemicznych i modeli	20
2.2.5. Specyficzne zagadnienia aerozoli i toksycznych substancji niebezpiecznych	20
2.2.6. Moduł zarządzania w CTM	20
2.2.7. Moduł koncentracji początkowych i warunków brzegowych	21
2.2.8. Podsystem prognozowania jakości powietrza w aglomeracjach miejskich	21
2.2.9. Moduł przetwarzania emisji	22
2.3. Ocena jakości powietrza w AQMS	23
3. System modelowania jakości powietrza CMAQ	24
3.1. Uwagi ogólne	24
3.2. Zasady modelowania i obliczeń procesów fizyczno-chemicznych w systemie modelowania CMAQ	27
3.3. Modularność w CMAQ	28
3.4. Mechanizmy ograniczania generowania błędów	30
3.5. Modelowanie meteorologiczne w celu oceny jakości powietrza	30
3.5.1. Zasady ogólne	30
3.5.2. Równania główne uwzględniające ściśliwość atmosfery	31
3.5.3. Dane meteorologiczne stosowane w CMAQ	34
3.5.4. Meteorologia i chemia	35
3.6. Modelowanie emisji	37
3.6.1. Zasady ogólne	37
3.6.2. Inwentaryzacja źródeł emisji	37
3.6.3. Przestrzenna zmienność danych emisyjnych	37
3.6.4. Czasowe skale danych emisji	38
3.6.5. Chemiczny skład emisji – mechanizmy chemiczne	38
3.6.6. Modelowanie emisji w zależności od rodzaju źródła	39

3.7. Równanie transportu zanieczyszczeń w atmosferze	41
3.8. Procesory wejścia w CMAQ	42
3.8.1. Struktura powiązań procesorów wejścia w CMAQ	42
3.8.2. MCIP – procesor interfejsu chemii meteorologicznej	43
3.8.3. ICON i BCON – procesory warunków początkowych i brzegowych	45
3.8.4. JPROC – kalkulator prędkości fotolizy w warunkach czystego nieba	46
3.8.5. Kompilator mechanizmów chemicznych CHEMMECH	47
3.8.6. PDM – model dynamiki chmury do obliczeń podsiatkowych – Plume-In-Grid	48
3.8.7. PROCAN – preprocesor analiz procesów obliczeń	48
3.9. Moduły procesów fizyczno-chemicznych w modelu transportu substancji chemicznych CMAQ	49
3.9.1. Uwagi ogólne	49
3.9.2. Pakiety rozwiązujące równania kinetyki chemicznej w fazie gazowej	50
3.9.3. Fotoliza	50
3.9.4. Dyfuzja i adwekcja	51
3.9.5. Zawieszone cząstki pyłu	52
3.9.6. Chmury i procesy chemiczne w fazie wodnej	53
3.9.7. Podsiatkowe modelowanie chmury zanieczyszczeń	53
3.10. Interfejs użytkownika CMAQ	53
3.11. Definiowanie siatek warstw i mechanizmów chemicznych w CMAQ ..	54
3.11.1. Systemy współrzędnych obsługiwane przez CMAQ	54
3.11.2. Siatki poziome	55
3.11.3. Warstwy pionowe	56
3.11.4. Mechanizmy chemiczne	56
3.12. Przygotowanie nowych symulacji w CMAQ	57
3.12.1. Uwagi ogólne	57
3.12.2. Definiowanie nowej poziomej siatki obliczeniowej	58
3.12.3. Definiowanie nowej struktury warstw pionowych	59
3.12.4. Ustawienie nowego okresu symulacji	59
3.12.5. Warunki początkowe i brzegowe	60
3.12.6. Nazwa i lokalizacja plików wejściowych i wyjściowych	61
3.12.7. Konfigurowanie opcji procesów fizyczno-chemicznych	61
3.13. Pakiety narzędziowe programu CMAQ	62
3.13.1. Interfejs programowania aplikacji wyjścia/wejścia	62
3.13.2. Operatory netCDF i NCO	63
3.13.3. Środowisko informatyczne IDV	63
3.13.4. Język NCL	63
3.13.5. Model AMET	64

4.	SMOKE – system wspomagania modelowania emisji	65
4.1.	Podejścia do szacowania emisji	65
4.2.	Identyfikacja źródeł, rodzajów i wielkości emisji	66
4.3.	Techniki modelowania i przetwarzania emisji w SMOKE	69
4.3.1.	Ogólne zasady modelowania	69
4.3.2.	Wzajemne odniesienia i profile	70
4.3.3.	Strukturyzacja danych	71
4.3.4.	Przetwarzanie czasowe	71
4.3.5.	Przetwarzanie przestrzenne	72
4.3.6.	Przetwarzanie specjacji chemicznych	73
4.4.	Symulacja zarządzania emisjami	73
4.5.	Kontrola reaktywności emisji	74
4.6.	Przekształcanie emisji	74
4.7.	Wyjątki w zasadach przetwarzania	76
5.	Mezskalowy model prognozowania parametrów meteorologicznych MM5	77
5.1.	Wprowadzenie do systemu MM5	77
5.1.1.	Informacje ogólne o systemie	77
5.1.2.	Siatka pozioma i pionowa modelu MM5	80
5.1.3.	Zagnieżdżanie siatek	82
5.1.4.	Warunki brzegowe (poziome)	83
5.1.5.	Porównanie dynamiki niehydrostatycznej i hydrostatycznej	84
5.1.6.	Stan odniesienia w modelu niehydrostatycznym	84
5.1.7.	Czterowymiarowa asymilacja danych	85
5.1.8.	Kategorie pokrycia terenu	87
5.1.9.	Typy rzutowania powierzchni Ziemi i czynniki skalowania mapy ..	87
5.1.10.	Dane wymagane do symulacji	87
5.2.	Moduł TERRAIN	88
5.3.	Moduł REGRID	90
5.4.	Moduł INTERPF	90
5.5.	Moduł MM5	92
5.5.1.	Przeznaczenie i podstawowe równania modelu MM5	92
5.5.2.	Opcje fizycznego modelu modułu MM5	95
5.6.	Dane wynikowe systemu MM5	98
5.7.	Uruchomienie systemu MM5 na klastrze Beowulf – przykład obliczeń testowych	99
5.7.1.	Konfiguracja modelu MM5	99
5.7.2.	Przykładowa symulacja prognozy pogody	102
5.8.	Usprawnienia w modelowaniu meteorologicznym procesów wymiany między powierzchnią gruntu a powietrzem atmosferycznym	102
6.	Nowoczesne modelowanie rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń za pomocą modeli wysokiej wierności	104

6.1. Uwagi ogólne	104
6.2. Modelowanie turbulencji	106
6.3. Ogólna koncepcja połączenia modeli transportu i dyspersji zanieczyszczeń w atmosferze z modelami CFD	114
6.4. Wykorzystanie pakietu FLUENT do modelowania transportu i dyspersji zanieczyszczeń w małej skali	119
6.5. Podsumowanie	123
7. Ochrona jakości powietrza w Polsce	124
7.1. Podstawa prawna	124
7.2. Zasady klasyfikacji źródeł i inwentaryzacji emisji stosowane w Polsce ..	125
7.3. Baza danych inwentaryzacyjnych	129
7.4. Organizacja monitoringu w województwie mazowieckim	130
7.4.1. Pozyskiwanie danych pomiarowych	130
7.4.2. Gromadzenie danych pomiarowych	132
7.4.3. Rozbudowa systemu monitoringu	132
7.4.4. Wspomaganie systemu monitoringu powietrza w województwie ..	133
7.5. Możliwość i problemy dostosowania systemu modelowania emisji SMOKE do warunków polskich	134
8. Piśmiennictwo	138
Załączniki	147
Extended summary	173