



НАЦИОНАЛЕН ИНСТИТУТ ПО МЕТЕОРОЛОГИЯ И ХИДРОЛОГИЯ
Департамент "МЕТЕОРОЛОГИЯ"
Секция "Моделиране на атмосферното замърсяване"



МОДЕЛИРАНЕ НА ДИСПЕРСИЯТА НА ЗАМЪРСИТЕЛИ В АТМОСФЕРНИЯ ВЪЗДУХ В ГРАДСКА СРЕДА

Антон Ботев Петров

АВТОРЕФЕРАТ

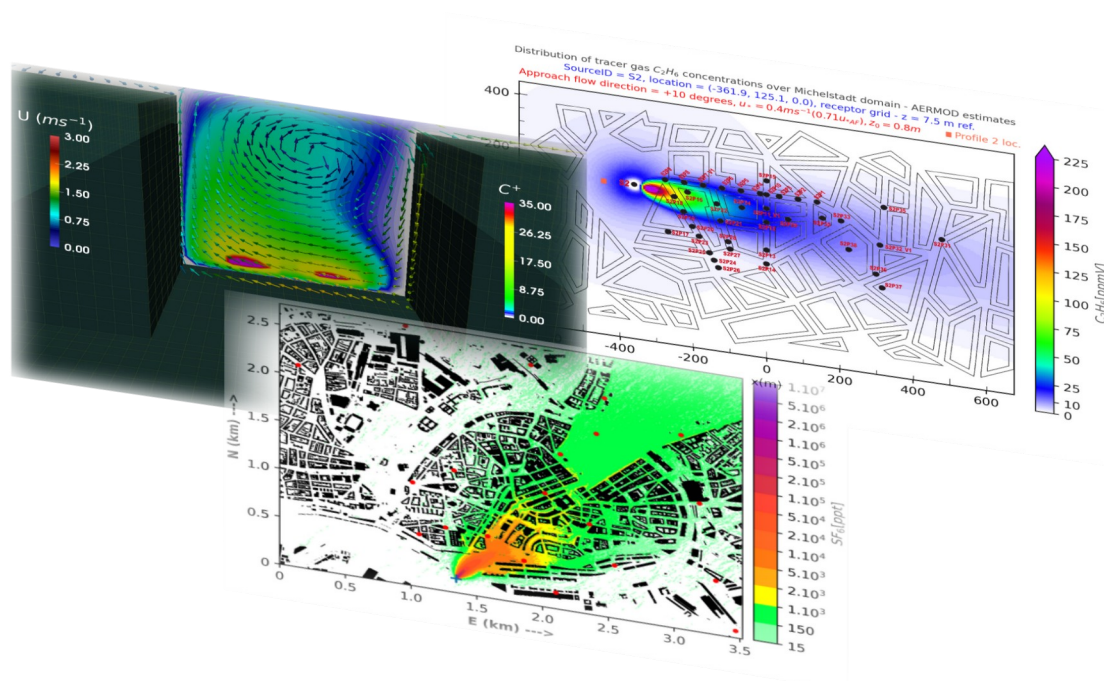
НА ДИСЕРТАЦИЯ

За присъждане на образователна и научна степен „Доктор“
в област на висше образование 4. Природни науки, математика и
информатика, професионално направление 4.1 Физически науки
(метеорология)

Научен ръководител: проф. д-р Димитър Георгиев Атанасов

Научни консултанти: проф. д-р Емилия Венкова Георгиева

проф. д-р Екатерина Ангелова Бъчварова



София, 2023

Дисертационният труд се състои от 7 глави и е с обем 154 страници. Съдържа 54 фигури, 20 таблици и 45 уравнения. Използваната литература включва 262 заглавия.

Дисертационният труд е обсъден и насочен за защита на заседание на разширен научен семинар на департамент „Метеорология“, проведен на 25.09.2023 г., съгласно заповед № НД 04-12/20.09.2023 г. на Генералния директор на НИМХ.

Състав на научното жури

проф. дфн. Димитър Сираков – НИМХ
проф. д-р Димитър Атанасов – НИМХ
чл.-кор. проф. дфн. Костадин Ганев – НИГГГ - БАН
проф. д-р Георги Гаджев – НИГГГ - БАН
доц. д-р Ивелина Георгиева – НИГГГ - БАН

Резервни членове

доц. д-р Христо Червенков – НИМХ
доц. д-р Ренета Димитрова – физически факултет на СУ “Климент Охридски”

Защитата на дисертационния труд ще се състои на в часа в зала на НИМХ, гр. София

Номерата на фигурите, таблиците и уравненията в автореферата не следват тези в дисертацията, а са дадени в последователен ред

СЪДЪРЖАНИЕ

I. Въведение.....	1
1. Актуалност на проблемите, свързани със замърсяването на въздуха в градска среда....	1
2. Кратък обзор на изследванията по моделиране на атмосферното замърсяване в градска среда.....	2
2.1. Най-общо за моделиране в градска среда.....	2
2.2. Ефекти при обтичане на сгради по експериментални данни.....	2
2.3. Числено моделиране на замърсяване на въздуха в градска среда у нас.....	3
3. Цел на дисертацията. Основни задачи.....	4
II. Теоретични основи в моделирането на атмосферното замърсяване в градска среда...5	5
1. Атмосферен граничен слой – понятие и основни характеристики.....	5
2. Източници на замърсяване. Видове замърсители.....	6
2.1. Видове източници на замърсяване.....	6
2.2. Видове замърсители.....	7
3. Класификация на моделите за атмосферно замърсяване.....	8
3.1. Класификация според отчитането наличието на пространствено-времеви изменения в атмосферните условия.....	8
3.2. Класификация по мащаб.....	8
3.3. Класификация според използвания физически и математически подход.....	9
4. Статистически показатели за оценка на реализацията и валидността на моделите.....	10
III. Гаусови дисперсионни модели. Моделиране на дисперсията на замърсители с AERMOD, TRACE и ALOHA.....	11
1. Понятие за Гаусов дисперсионен модел. Съвременни представители, техните възможности и приложения.....	11
2. Кратко описание на Гаусовите дисперсионни модели ALOHA, TRACE и AERMOD...12	12
2.1. ALOHA.....	12
2.2. TRACE.....	12
2.3. AERMOD.....	12

3. Проведени симулации и оценка на работата на Гаусовите модели ALOHA, TRACE и AERMOD.....	12
3.1. Описание на аеродинамичния тунел и използваната експериментална база данни.....	12
3.2. Подготовка и настройка на моделите.....	14
4. Резултати и коментари.....	15
4.1. ALOHA.....	15
4.2. TRACE.....	17
4.3. AERMOD.....	19
5. Обобщение и изводи.....	22

IV. Лагранжеви дисперсионни модели. Моделиране на дисперсията на замърсители с модела GRAL.....22

1. Понятие за Лагранжев дисперсионен модел. Съвременни представители, техните възможности, производителност и приложения.....	22
2. Описание на моделната система GRAMM/GRAL.....	22
3. Тестове и оценка на работата на Лагранжевия модел GRAL.....	23
3.1. Тестове с полеви измервания от “Експеримент в комплексна градска среда” (The Complex Urban Terrain Experiment – CUTE, COST ES1006).....	23
3.2. Моделиране разпределението на замърсители около сгради в район от гр. София при различни метеорологични условия.....	27
4. Обобщение и изводи.....	31

V. Числени флуидодинамични (CFD) модели. Моделиране на дисперсията на замърсители в идеализиран уличен каньон с OpenFOAM.....32

1. Понятие за CFD модел. Съвременни представители, техните възможности, производителност и приложения.....	32
2. Описание и кратка история на CFD модела OpenFOAM. Възможности и производителност.....	32
3. Тестове и оценка на работата на CFD модела OpenFOAM за замърсяване в идеализиран уличен каньон.....	33
3.1. Описание на аеродинамичния тунел и използваната експериментална база данни.....	33

3.2. Подготовка и настройка на модела.....	34
3.3. Резултати и коментари.....	38
4. Сравнение на резултати от OpenFOAM и други модели.....	41
5. Обобщение и изводи.....	43
VI. Заключение.....	43
VII. Научни приноси, публикации и представяне на резултатите по дисертацията.....	44
1. Приноси на дисертационния труд.....	44
2. Публикации по дисертацията.....	45
3. Участия в проекти.....	46
3.1. Ръководителство на научни проекти, финансирани от български източници.....	46
3.2. Участие в научни проекти, финансирани от чуждестранни източници.....	46
4. Представяне на резултатите от дисертацията.....	47
4.1. Представяне на резултатите на научни форуми.....	47
5. Награди.....	47
БИБЛИОГРАФИЯ.....	48

БЛАГОДАРНОСТИ

Много са хората, на които бих искал да благодаря за всеотдайната и безкористна подкрепа в работата ми по дисертацията. Списъкът е твърде дълъг и затова предварително моля да ми простят колегите, които не съм споменал поименно. Благодаря на моя научен ръководител, проф. д-р Димитър Атанасов, който ми даде пълната свобода да се потопя в дълбините на микромащабното моделиране и ме насърчаваше да изучавам повече модели. Сърдечни благодарности поднасям на проф. д-р Емилия Георгиева – за огромната помощ и подкрепа, които ми оказа като консултант, не само при редакцията и оформянето на дисертацията, но и по целия ми дълъг път на докторант. Няма да забравя, как в последните най-напрегнати моменти от написването на дисертационния труд, тя не пожали време и усилия да ми помогне в тази нелека задача, въпреки всичката останала работа, която имаше да върши. Голяма благодарност изказвам и към чл. кор. Екатерина Бъчварова, която ми даде начален тласък, буквално хвърляйки ме в дълбоките води на морето от професионалисти – участници в COST Акция ES1006. Благодарен съм и на всички колеги от секции „Моделиране на атмосферното замърсяване“ и „Приложна метеорология“, които продължават да ми оказват и физическа, и морална подкрепа в успешното извеждане на това начинание докрай. Няма да пропусна да спомена с благодарност и доц. д-р Лилия Бочева, която всеки път като ме срещнеше, размахваше пръст и ме питаше „Пишеш ли?“. Благодаря на всички вас, колеги от НИМХ – за спокойната и предразполагаща към работа атмосфера, която създавате!

Както в личен, така и в професионален план – поднасям огромна благодарност и любов към моята съпруга и колежка Ваня Манева-Петрова, която вдигна от плещите ми тежестта на административната работа, свързана с дисертацията – телефонни обаждания, окомплектоване на документи, печат и много други дейности, които биха ме разсеяли и забавили в изработването на труда. Искам да поднеса и специална благодарност към моята майка, която ме научи, че по-сладко и ценно е това, което се постига с труд, отколкото това, което се получава наготово. Посвещавам този труд на моите деца – Николета и Антон, с пожеланието винаги да имат избор и да постигат с лекота много повече от това, което съм постигнал аз.

Най-накрая – като покривало на всички благодарности изказани дотук, като дух, който е навсякъде и всичко изпълва, искам – като вярващ човек – да поднеса своята почит и неизразима благодарност към нашия Творец вседържител.

I. Въведение

Моделите за атмосферно замърсяване са средство за числено описание на взаимовръзки между емисии, метеорологични фактори, концентрация на замърсителите, техния транспорт и трансформации, отлагането им (депозиция) и т.н. Те се явяват все повече като неотменим подход за допълване на данни от измервания. Измерванията на атмосферното замърсяване в специализирани кампании дават важна количествена информация за концентрацията на замърсителите, но те могат да дадат представа за качеството на въздуха само в определени точки от пространството. Моделирането, от своя страна, дава по-пълна картина на пространствено-времето разпределение на замърсителите във въздуха и дават възможност за анализ на влиянието на редица фактори (източници на замърсяване, метеорологични процеси, физически и химически трансформации), както и предоставят научно-обоснована база за вземането на евентуални превантивни мерки.

Дисперсионните модели са крайно необходими както за регулаторни цели, така и за научно-изследователски приложения и анализи, свързани с оценка на въздействието върху околната среда, което – от своя страна – определя и необходимостта от все по-качествени моделни резултати.

1. Актуалност на проблемите, свързани със замърсяването на въздуха в градска среда

По отношение на опазването на човешкото здраве, дисперсията на замърсители в атмосферата представлява проблем от особено важно значение (Lateb, 2016). В градските райони се срещат източници (напр. ресуспендиран прах от пътни платна и открити площи, транспорта, битовото отопление, отделени миризми и токсини), които могат да бъдат неблагоприятни и дори опасни (ASHRAE, 2007). В рамките на града – където плътността на застрояването е по-висока, замърсителите могат да бъдат уловени като в капан и да се натрупват, увеличавайки по този начин концентрацията си (Rock and Moylan, 1999).

Качеството на градския атмосферен въздух (КГВВ) е тясно свързано с потоците в атмосферния граничен слой (АГС) и техните взаимодействия с препятствията. В ниската част на АГС и по-специално – в градовете – около индивидуални или групи от сгради, локалното поле на вятъра се състои от сложни конфигурации на потоците, включително и от зони на рециркулация и на застои (Easom, 2000). Като следствие, проследяването на преноса на замърсителите се усложнява значително.

Според доклада на Европейската Агенция по Околната Среда (ЕАОС) от 2016 година, основни замърсители в европейските градове са азотният диоксид (NO_2) и фините прахови частици (ФПЧ) (ЕЕА, 2016). България е на едно от челните места по замърсяване с ФПЧ, с концентрации над пределно допустимите, определени от Европейската Директива за качество на въздуха (EC Directive, 2008). Замърсяването с ФПЧ се дължи основно на натоварения автомобилен транспорт в градовете, прашните пътни настилки, отопляването с твърди горива през студеното полугодие, строително-ремонтни дейности и др.

2. Кратък обзор на изследванията по моделиране на атмосферното замърсяване в градска среда

2.1. Най-общо за моделиране в градска среда

Използването на даден вид модел се определя от конкретната задача, например – дали ще се моделира замърсяване в локален мащаб (кръстовище, част от града – улица, квартал) или замърсяване в целия град, видът на замърсителя, целта на моделирането и др. При моделиране на замърсяването в целия град често се използват Ойлерови модели с вместени области, които позволяват да се отчитат влияния на процеси на пренос от регионален характер (например от страната или съседни градове към даден град), например – системата за замърсяване в района на Париж, базирана на модела CHIMERE (Menut et al., 2021). В тези модели влиянието на градската среда е параметризирано, не се отчитат явно отделни нейни елементи, и разделителната способност е обичайно 1 km. Друг подход е да се използват комбинация от Ойлеров и Гаусов модел, както е предложено за Скандинавските страни и Норвегия, на база на Ойлеровия модел EMEP-MSC-W и Гаусов под-мрежов модел с резолюция между 50-250 m (Denby et al., 2020).

Най-често ефектите от елементите на градската среда (сгради, улици и др.) се отчитат чрез параметризации. Явно отчитане на тези елементи при пространствена резолюция от няколко метра е характерно за комплексните CFD (Computational Fluid Dynamics) модели, които вследствие на бурното развитие на компютърните технологии и на прилаганите числени методи, намират все по-голямо практическо приложение (Jeanjean et al., 2015).

2.2. Ефекти при обтичане на сгради по експериментални данни

Въздушните потоци в атмосферния граничен слой над сградите притежават свойствена за конкретното им местоположение сложност и се проявяват в цяла палитра от физични феномени – огромни зони с ниски скорости на вятъра, големи градиенти в налягането, в отделни райони – неустойчивост на потоците, триизмерни ефекти и сливане на гранични слоеве и турбулентни вихри (Deck, 2005).

Редица различни подходи са били широко използвани за изучаване на дисперсията на замърсители около сгради:

- Полеви измервания в реален мащаб (Drivas and Shair, 1974; Stathopoulos et al., 2008; Y Carpentieri et al., 2012; Yassin, 2013; Meroney et al., 2015);
- Физическо моделиране (в аеродинамичен тунел), (Li and Meroney, 1983; Poreh and Cermak, 1990; White, 2003; Aubrun and Leitzl, 2004; Gomes et al., 2007; Nakiboglu et al., 2009; Liu et al., 2010; Carpentieri et al., 2012);
- Полу-емпирични методи (Saathoff and Stathopoulos, 1997; Ratcliff and Sandru, 1999; Musalaiah et al., 2013);
- Симулации с изчислителни модели за динамиката на флуидите (CFD) (Lateb et al., 2010; Yoshie et al., 2011; Weil et al., 2012; Rodriguez et al., 2013; Blocken, 2015; Gousseau et al., 2015);

Сред споменатите по-горе източници, по отношение на приложените методи на изследвания, само физическите измервания се считат подходящи за валидация на даден модел.

Експериментални данни демонстрират, как смущаването на въздушния поток при различни конфигурации на сградите може да промени локалните концентрации с няколко порядъка (Lien et al., 2006). Следователно, за да могат по-добре да се разберат и изучат процесите определящи дисперсията на замърсители в градска среда, се налага максимално точно да се определят модификациите на въздушния поток при наличие на сгради (Tseng et al., 2006).

2.3. Числено моделиране на замърсяване на въздуха в градска среда у нас

У нас използването на модели за атмосферно замърсяване в градска среда най-общо се осъществява в рамките на научно-приложни изследвания от научни институции, или от консултантски фирми работещи по програми на отделни общини за подобряване на качеството на атмосферния въздух (КАВ). Съответно използваните модели са с различна степен на сложност.

В НИМХ и НИГГГ-БАН има разработени системи за прогноза на химическото време, в които районът на град София е най-малкият от няколко вместени моделни области (Syakov et al., 2014, Georgieva et al., 2015, Gadzhev et al., 2018, Ivanov and Georgieva, 2021). Различните версии на българската система за прогноза на химическото време (БСПХВ) са създадени на базата на модели, препоръчваната от Агенцията за опазване на околната среда на САЩ (US EPA) и включват метеорологичен модел (MM5 или WRF), химически транспортен модел (Ойлеров тип) (CMAQ) и подходящи свързващи модули. За района на град София разделителната способност на моделите е 1 km, като пресмятанията се извършват със стандартни опции за параметризации на процесите в АГС, при които не се отчитат специфичните ефекти на градската структура върху модификациите на потока и промените в турбулентните потоци топлина.

За целите на КАВ програми на отделни общини най-широко се използват модели от Гаусов тип (AERMOD, препоръчан от US EPA). Ефектите на градската среда се отчитат чрез по-големи и променливи стойности на параметъра на грапавост (КАВ София, 2020; КАВ Бургас, 2021).

В НИМХ е разработена система за управление качеството на въздуха в град Пловдив, която работи в оперативен режим от 2004 г. (Atanassov et al., 2006). Наред с модулите на метеорологичния препроцесор и емисиите, системата включва два вида дисперсионни модела – единият, PolTran, е комбинация от Ойлерова адвективна схема с пресмятания за турбулентна дифузия, а другият, AUSTAL2000 е от Лагранжев тип. Пресмятанията за региона на Пловдив са с резолюцията е 1 км, а за градската част – 250 м. Наскоро тази система е използвана за създаване на прототип на система, която е комбинация от Ойлеров модел прилаган в по-голяма област и локални модели за дисперсията на замърсители в градската среда (Georgieva et al., 2021).

Ще отбележим един друг тип модел, разработен в НИМХ за прогноза на потенциала на атмосферата за замърсяване с фини прахови частици в Столична община. Този модел е основан на статистически подход с намиране на връзки между измерени концентрации на

фини прахови частици в станциите на ИАОС-МОСВ в гр. София и редица метеорологични параметри, прогнозираны от оперативни модели на времето в НИМХ. Подобен подход се разработва наскоро за NO_2 и O_3 (Neukov et al., 2023).

В Софийски Университет, катедра Метеорология и Геофизика, за изследване на замърсяването в гр. София се използва Гаусов модел от по-съвременен тип – моделът ADMS-Urban (Dimitrova and Velizarova, 2021). Пресмятания с резолюция 50 m указват голяма пространствена изменчивост на концентрациите, специфична за различни замърсители.

Използването на сложните хидродинамични модели (тип CFD) за целите на атмосферно замърсяване у нас е все още много ограничено. Едно първо такова приложение е проведено в НИМХ и част от настоящата дисертация (Petrov, 2019).

С напредването на компютърните ресурси, към използването на този тип модели, се ориентират и експерти на института GATE за научни изследвания и иновации в областта на Големите данни и Изкуствения Интелект в България и Източна Европа. Pantusheva et al. (2022) представят обзор и основни характеристики на CFD модели за изучаване дисперсията на замърсители в градска среда.

3. Цел на дисертацията. Основни задачи

Основната цел на дисертацията е изследване на възможностите на различни по сложност модели за разпространението на замърсители във въздуха и на тяхната приложимост в градска среда. Специално внимание се обръща на по-комплексните модели, като под “комплексни” следва да разбираме такива модели, които явно, а не чрез параметризации отчитат влиянието на сградите и други препятствия върху преминаващия въздушен поток, а от там и върху дисперсията на замърсителите. Допълнителна цел е определяне на критичните елементи при моделиране на замърсяване в конкретен район от град София.

Основна задача на дисертационния труд е изучаването на зависимостта на пространствено-времето разпределение на концентрациите на примеси в атмосферата около сгради и улици, от метеорологичните условия, подложната повърхност и източниците на замърсяване, чрез провеждане на числени симулации с подбрани модели за динамиката и разпространението на замърсители в градска среда.

Най-общо задачите на представените изследвания са:

- 1) Проучване и критичен анализ на използваните понастоящем различни видове числени модели за дисперсията на замърсители в градска среда.
- 2) Подбиране на подходящи представители от няколко типа дисперсионни модели – Гаусови, Лагранжеви, CFD-Ойлерови, като се използват следните критерии:
 - Моделът да е достъпен за безплатно ползване без ограничения;
 - Моделът да е съобразен с изискванията на най-съвременните научни постижения;
 - Моделът да е с отворен код. Това изискване се ръководи главно от възможността за компетентни корекции при откриване на грешки в кода. Важно е също, софтуера да бъде съвместим с повече операционни системи.
- 3) Провеждане на симулации и тестове относно приложимостта на избраните дисперсионни модели в градска среда, включително и при аварийни ситуации на замърсяване.

- 4) Анализ и оценка на качеството на работа на всеки от избраните модели. Прилагане на статистически методи за оценка на моделни резултати като стойностите на моделираните концентрации се сравняват с тези от реални полеви измервания и от измервания в аеродинамичен тунел;
- 5) Преценка на възможността и условията за практическо приложение в България на по-сложни дисперсионни модели за оценка на качеството на атмосферния въздух, които да дадат основа за препоръки и предприемане на предварителни стъпки към въвеждането на подобни модели в програмите за подобряване качеството на въздуха в големите населени места.

II. Теоретични основи в моделирането на атмосферното замърсяване в градска среда

1. Атмосферен граничен слой – понятие и основни характеристики

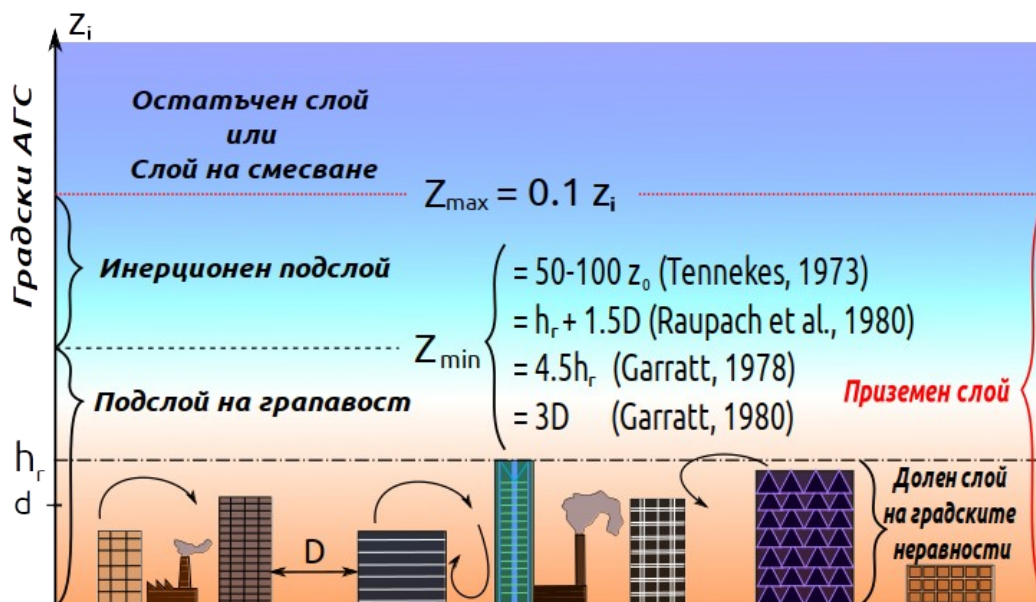
Според влиянието, което оказва подложната повърхност, тропосферата може да бъде разделена на два слоя: атмосферен граничен слой (АГС), долната граница на който е земната (или водната) повърхност, а горната достига до 1000 – 1500 m и свободна атмосфера, започваща от тази височина и достигаща тропопаузата.

По дефиниция, атмосферният граничен слой е тази най-долна част от тропосферата, която е директно повлияна от земната повърхност и откликва на въздействието ѝ във времеви интервал от един час или по-малко. Това въздействие включва триене, изпарение и кондензация, топлообмен, излъчване на замърсители и промени в характера на въздушния поток под действието на граваостта и на релефа. (Stull, 1988; Е. Сираков, 2011).

Присъствието на гъсто застрояване характеризиращо се с нетипична за природата геометрия, силно модифицира структурата на АГС над градски територии. Това налага разглеждането на т. нар. *градски атмосферен граничен слой (ГАГС)*. Вертикалната структура на ГАГС е дадена на *Фиг. 1*.

В най-долната част на ГАГС се разполага градският приземен слой (ГПС), който се състои от два подслоя:

- *Подслой на граваост (англ. roughness sublayer).* Това е долната част на ГПС, която е силно повлияна от сградите и други неравности, поради което въздушният поток е силно променлив в пространството и времето. Този слой, от своя страна може да бъде разделен на два подслоя – (долен) слой на градските неравности (англ. *urban canopy layer*), който се разполага от земната повърхност до средната височина на сградите при покривите (кота било, ако покривът е скосен) и слоя над него от ниво h_r до долната граница на инерционния слой z_{min} (или z_*).
- *Инерционен подслой (inertial sublayer).* Това е слой, в който се счита, че метеорологичните параметри са в равновесие с постилащата повърхност и влиянието на хоризонталните нееднородности може да се пренебрегне (Сираков, Е., 2011).



Фиг. 1. Структура на градски атмосферен граничен слой. z_i е височината на слоя на смесване (през деня) или на остатъчния слой (през нощта), h_r е средната височина на сградите, d - височина на отместване, D - типично (средно) разстояние между сградите (по Oke (1987) и Rotach (1993)).

За повърхности с малки по размер елементи на грапавост, ПГ е с много малка дебелина и в такъв случай обменът на импулс и скаларни потоци в инерционния подслой може да се изрази посредством теорията на подобие на Монин-Обухов. Теорията на подобие, обаче изразява връзката между импулса и скаларните потоци върху хоризонтално хомогенни повърхности. Това означава, че тя важи, когато измерените в една точка потоци са представителни за цялата разглеждана повърхност и се приеме, че височината над земната повърхност е единственият подходящ мащаб за дължина. Взаимовръзките между потоци и градиенти, изразени чрез теорията на подобие на Монин-Обухов са приложими за инерционния подслой (Wood et al. 2010), но не и за подслоя на грапавост. Там, тези отношения се модифицират чрез използване на коригиращи функции, които представят в проста аналитична форма ефектите в ПГ (Garratt, 1980).

2. Източници на замърсяване. Видове замърсители

2.1. Видове източници на замърсяване

Необходимите данни, подходът на моделиране и изборът на модел за оценяване на качеството на въздуха, могат да зависят и от типа на източника. Източниците могат да бъдат класифицирани на:

- **Точкови източници.** Това са комини или изолирани изпускателни отвори, които обикновено имат издигане на димната струя (англ. *plume rise*), причинено от действащите ѝ архимедови сили и/или от импулса, който излизащият с някаква скорост газ има.
- **Площните източници** са източници, които, в болшинството от случаите са разположени на земната повърхност или близо до нея и заемат определена площ – сметица, открити рудници, паркинги и т.н. Като площи могат да бъдат представени и

групи от точкови източници намиращи се нагъсто в определен район – такава е практиката, например, при моделиране на замърсяването от битовото отопление.

- **Обемни източници.** При тях моделирането предполага изпускане на замърсители от някакъв обем. Примери за обемни източници са поточните линии и шнековете в даден производствен цех, както и колективните изхвърляния от източници разположени на различна височина в обособена индустриална зона.
- **Линейни източници.** Типичен пример за линейни източници са пътните участъци и железопътните линии, с движещите се по тях МПС и влакови композиции, съответно.
- **Източници от по-особен тип.** Включват множество паралелни емитиращи линии, което като резултат дава повишена дисперсия от конвективен тип (коксови пещи, електродъгови пещи за сепарация на алуминий); изпускане на плътни газове; високоскоростно изхвърляне; хоризонтални отдушници. За този тип източници се изискват и съответните по-специални техники на моделиране.

2.2. Видове замърсители

Понастоящем, качеството на атмосферния въздух е пряко свързано с потреблението на енергия. Все още, основен източник на енергия за транспорта и индустрията са твърдите и течните горива. Независимо от подобряването на технологиите и плановете за намаляване на вредните емисии, с разрастването на градовете, качеството на въздуха се влошава. Според Андреев и др. (2010), най-съществените атмосферни замърсители в градския въздух са:

- **Фини прахови частици (ФПЧ, англ. *particulate matter* – PM).** Това са аерозолите и малките частички прах, разпръснати във въздуха. По-голямата част от тях се изхвърлят от вулканичните изригвания и горските пожари. Емисии на ФПЧ в резултат от човешката дейност се получават главно от МПС (изгаряне на горива и вдигане на прах от пътната настилка – т. нар. ресуспензия) и от ТЕЦ-овете, работещи с въглища (те са източник и на серен диоксид, който образува PM като вторичен замърсител – сулфати).
- **Азотни оксиди (NO_x).** Образуват се при свързването на атмосферния азот с кислорода по време на запалването на гориво-въздушната смес в цилиндъра на ДВГ, при високо-температурно горене на природен газ в топлоелектрическите централи (ТЕЦ), а също и при заваръчни дейности в строителството. В природата NO_x се образуват главно от гръмотевична дейност.
- **Озон (O_3).** Озонът не се изхвърля директно от МПС или от производствени процеси. Той е вторичен замърсител, който се образува от фотохимични реакции. По-голямата част от тропосферния озон се образува, когато NO_x , CO и VOC реагират в атмосферата в присъствие на слънчева светлина (Seinfeld and Pandis, 1998).
- **Серен диоксид (SO_2).** Безцветен газ с остра задушлива миризма. Типичен замърсител, свързан с изгарянето на течни и твърди горива с високо съдържание на сяра, обогатяването на руди, производството на хартия. Съвместно с NO_x той е главна образуваща съставка на киселинните дъждове.
- **Въглероден оксид (CO).** Въглеродният оксид е газ без цвят, без мирис, малко по-лек от въздуха. Това е един от най-широко разпространените атмосферни замърсители, който се образува при непълното горене на въглеродсъдържащи материали. Най-голям източник на CO е автомобилния транспорт.

- **Въглеродороди и летливи органични съединения - ЛОС (Volatile Organic Compounds – VOC).** Както и CO, въглеродородите са резултат от непълното изгаряне на течните горива в ДВГ, но също и от изгарянето на твърди горива (дърва и въглища). Някои процеси в производството и употребата на органични разтворители също допринасят за емисиите на VOC. В числото на биологичните източници на въглеродороди са растителността и животновъдството.

3. Класификация на моделите за атмосферно замърсяване

3.1. Класификация според отчитането наличието на пространствено-времени изменения в атмосферните условия

Според това дали отчитат промените на метеорологичните условия в хода на разпространението на замърсителите, атмосферните дисперсионни модели могат да бъдат категоризирани в две основни групи: стационарни и нестационарни.

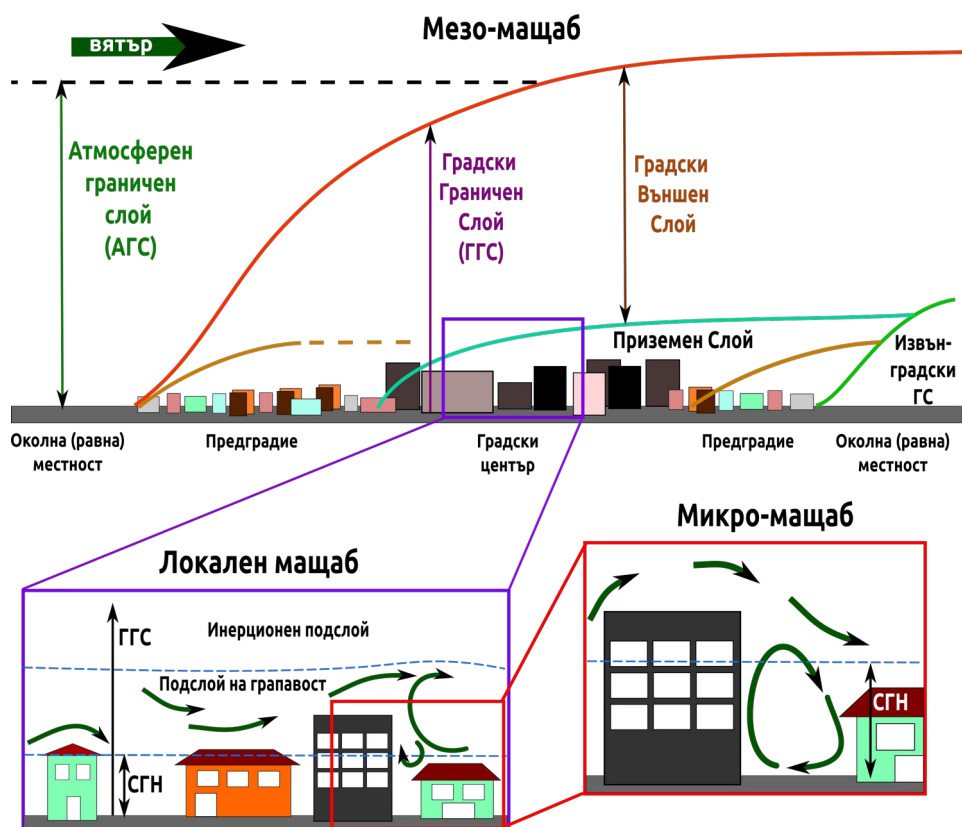
- **Стационарните модели** предполагат отсъствието на променящи се с времето процеси за определен времеви интервал (обикновено 1 час). При тях обикновено се използва метеорологична информация, получена от станция, намираща се възможно най-близо до източника и допускат предположението, че метеорологичните параметри не се променят в разглеждания район (обикновено в радиус до 50 km).
- **Нестационарни модели.** С тях могат да се моделират ефектите от променящите се във времето и пространството метеорологични въздействия върху преноса на замърсителите, тяхната трансформация и депозиция. Нестационарните модели често биват реализирани числено под формата на т. нар. гريد-модели (англ. *grid* – координатна решетка, мрежа), като численото моделиране на физичните и химични процеси се осъществява за всяка отделна клетка на координатната мрежа.

3.2. Класификация по мащаб

Замърсяването на въздуха в градска среда е свързано с физични и химични процеси, вариращи в широк пространствен и времеви диапазон. Имайки предвид средния размер на един по-голям град (10-30 km), следва да отнесем разглежданите в него процеси към междинния (среден, мезо) мащаб.

На *Фиг. 2* е дадено схематичното изображение на различните мащаби, влизащи в обсега на разглеждане на градското замърсяване (Srivastava and Rao, 2011; Сираков, 2011).

На разстояния от 10 до 30 километра в хоризонтално направление, природата на АГС е тази, която определя разпръскването на замърсителите от източници, разположени близо до земната повърхност. Процесите, протичащи в ГАГС допринасят за образуване на минимума в полето на импулса на хоризонталния въздушен поток (поради взаимодействието му с вертикалните потоци) и максимуми в полетата на температурата (образуване на острови на топлина) и замърсяването. По този начин, тяхното влияние може да обхване мащаби до 200 km.



Фиг. 2. Схематична диаграма, показваща процесите, модификацията на потоците и разглежданите мащаби в рамките на градския атмосферен граничен слой (Srivastava and Rao, 2011; Сираков, 2011).

3.3. Класификация според използвания физически и математически подход

Разглеждайки класификацията по този начин, най-общо могат да бъдат обособени две основни групи модели – физични и математически.

Физичните (инженерни) модели пресъздават градската среда в аеродинамичен тунел. Въпреки трудностите, свързани с премащабирането (обикновено мащаб 1:1300) на макета на града, тези модели дават изключително точна тримерна картина на турбулентните вихри. В това отношение те са незаменими, когато трябва да се изучава поведението на поток, обтичащ различни по форма препятствия и намират широко приложение в редица инженерни задачи (Cermak et al., 1995).

Математическите модели използват или статистически анализ на наличната информация, или математическо представяне на разглеждания физичен процес.

Като обобщение можем да кажем, че изборът на модел за точно определено приложение зависи от редица фактори, като:

- Природата на замърсителя (агрегатно състояние, химическа активност);
- Метеорологичните и топографски особености на изследваната област;
- Разпределението на източниците на замърсяване;
- Пространствената и времевата разделителна способност, необходима за анализа;
- Желаното ниво на прецизност и степента на неопределеност;
- Наличието на изчислителен ресурс;

- Техническата грамотност на крайния потребител при реализацията на модела със съответния изчислителен ресурс.

4. Статистически показатели за оценка на реализацията и валидността на моделите

Един модел може да бъде оценен най-малко по три начина: статистически (напр. Hanna et al.1993), научен (напр. Narro et al. 1998) и оперативен (напр. Chang et al. 1998), като в настоящата дисертация е прилаган статистическият метод за оценяване. Той се състои главно в сравняване на симулираните концентрации в рецепторните точки (c_p) с измерените (c_o), а също – и в степента на разпръснатост (англ. *scatter*) на точките при графично представяне. Основните статистически показатели, предложени от Hanna et al. (1993), които се използват широко за оценка на атмосферни дисперсионни модели (напр. Hanna and Chang, 2012) са:

- **Относително отклонение** (fractional bias – **FB**)

$$FB = \frac{\bar{c}_o - \bar{c}_p}{0.5(\bar{c}_o + \bar{c}_p)} \quad (1)$$

- **Средногеометрично отклонение** (geometric mean bias – **MG**)

$$MG = \exp(\overline{\ln c_o} - \overline{\ln c_p}) \quad (2)$$

- **Нормализирана средноквадратична грешка** (normalized mean square error – **NMSE**)

$$NMSE = \overline{(c_o - c_p)^2} / (\bar{c}_o \bar{c}_p) \quad (3)$$

- **Средногеометрична дисперсия** (geometric variance – **VG**)

$$VG = \exp\left[\overline{(\ln c_o - \ln c_p)^2}\right] \quad (4)$$

- **Коефициент на корелация** (correlation coefficient – **R**)

$$R = \frac{\overline{(c_o - \bar{c}_o)(c_p - \bar{c}_p)}}{\sigma_{c_o} \sigma_{c_p}}, \quad (5)$$

където

$$\sigma_{c_o} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (c_{oi} - \bar{c}_o)^2} \quad \text{и} \quad \sigma_{c_p} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (c_{pi} - \bar{c}_p)^2} \quad (6, 7)$$

са стандартните отклонения на измерените и моделираните концентрации съответно.

- **Частта от двойките измерени/моделирани данни от генералната съвкупност, която удовлетворява условието (FAC2):**

$$FAC\ 2: 0.5 \leq \frac{C_o}{C_p} \leq 2.0 \quad (8)$$

Един идеален модел би имал MG, VG, FAC2 и R = 1.0 и NMSE и FB = 0.0.

За оценяването на краткотрайните (във вид на облак) изхвърляния се прилагат характеристики на базата на величината доза – това е цялото количество замърсител достигащо рецептора, по време на измервателния период. Количествено се представя като производението на масовата или обемната концентрация на замърсителите и продължителността на преминаване на облака (напр. ppmVs, ppbVs, mg m⁻³ s и т.н.).

III. Гаусови дисперсионни модели. Моделиране на дисперсията на замърсители с AERMOD, TRACE и ALOHA

1. Понятие за Гаусов дисперсионен модел. Съвременни представители, техните възможности и приложения

Гаусовите струйни (“плум”, англ. plume – струя) са едни от първите и все още широко използвани модели за изчисляване на разпространението на замърсители в атмосферата. Едно от предимствата на този тип модели е, че могат да поддържат огромен брой източници, сценарии за емисиите и условията на дисперсия, както и рецепторна мрежа с произволна гъстота, с цената на скромнен изчислителен ресурс.

В Гаусовите модели пространствената динамика на разпространението на замърсителя се описва с уравнението (Srivastava and Rao, 2011):

$$C(x,y,z;He) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \left[\exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \cdot \left(\exp\left(\frac{-(z - He)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z + He)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right) \right] \quad (9)$$

където $C(x, y, z; He)$ е концентрацията на замърсителя в точка (x, y, z) ($mg\ m^{-3}$, $\mu g\ m^{-3}$, ppm , $ppmV$ и т.н.), u е скоростта на вятъра по x ($m\ s^{-1}$), σ са стандартните отклонения на концентрацията в направления y и z , т.е. перпендикулярно на посоката на вятъра (m), Q е емисията на замърсителя ($g\ s^{-1}$, $kg\ h^{-1}$) и He – ефективна височина на комина (m).

Гаусовите дисперсионни модели се използват главно за регулаторни цели. Един от най-широко прилаганите в цял свят е разработената от Агенцията по опазване на околната среда на САЩ (US EPA) интегрална моделна система AERMOD, която намира приложение и у нас (например – в Комплексна програма за подобряване качеството на атмосферния въздух на територията на Столична община за периода 2021-2026).

В тази глава се разглеждат моделите AERMOD, ALOHA и TRACE. Представените тук изследвания са по-специфични, тъй като целта е да се провери приложимостта на моделите

при аварийни ситуации, като се направи сравнение между моделираните и измерените концентрации на тестов замърсител в аеродинамичен тунел.

2. Кратко описание на Гаусовите дисперсионни модели ALOHA, TRACE и AERMOD

2.1. ALOHA

ALOHA (**A**real **L**ocations of **H**azardous **A**tmospheres) (Jones et al., 2013) е Гаусов дисперсионен модел, който се използва като средство за ранно предупреждение при аварийни ситуации и за превантивна оценка на разпространението в атмосферата на опасни химични вещества. Част е от разработения пакет инструменти CAMEO (одобрен и използван от USA-EPA), предназначен за улесняването на работата на пожарникари, гражданска защита и други аварийни служби (<https://www.epa.gov/cameo/aloha-software>).

2.2. TRACE

TRACE v10.1 (**T**oxic **R**elease **A**nalysis of **C**hemical **E**missions) (понастоящем (2023г.) – Safer One, <https://www.indsci.com/en/safer-one>) е Гаусов дисперсионен модел, който се използва като средство за ранно предупреждение в случаи на аварии и за превантивна оценка на разпространението в атмосферата на опасни химични вещества. Разработен е от SAFER Systems, която сега е част от корпорацията Industrial Scientific (<https://www.indsci.com/en/about>) и е предназначен да осигури на индустрията от частния сектор, както и на държавни предприятия и правителствени агенции инструменти за регулация по безопасността на труда и опазване на околната среда.

2.3. AERMOD

AERMOD (**A**MS/**E**PA **R**egulatory **M**odel) е интегрална моделна система, използвана за регулаторни цели, която включва в себе си 3 модула (AERMOD, 2022):

- Стационарен Гаусов дисперсионен модел, предназначен за моделиране на разпространението на замърсители на малки разстояния (до 30-50 km) от неподвижни източници.
- Метеорологичен препроцесор AERMET, който асимилира данни от наземни измервания, аерологични сондажи и, по възможност – от автоматични метеорологични станции (АМС).
- Теренен препроцесор AERMAP, чието предназначение е да изчисли физическата връзка между особеностите на терена и поведението струите от замърсител.

3. Проведени симулации и оценка на работата на Гаусовите модели ALOHA, TRACE и AERMOD

3.1. Описание на аеродинамичния тунел и използваната експериментална база данни

В аеродинамичния тунел “WOTAN” в лабораторията на Метеорологичния Институт към Хамбургския Университет са проведени измервания на въздушните потоци и на дисперсията

3.2. Подготовка и настройка на моделите

3.2.1. Използвани входни данни

Входните данни, използвани за числени пресмятания с моделите ALOHA, TRACE и AERMOD, са дадени в Таблица 1. Извършени са тестове за чувствителност с промяна на посоката на вятъра ($\pm 5^\circ$).

Таблица 1. Приложени входни данни за ALOHA, TRACE и AERMOD

Източник (точков)	
Вид замърсител	C ₂ H ₆ (етан)
Местоположение (x, y, z)	“S2” в т. (0.0, 0.0) m за ALOHA и TRACE, и (-361.9, 125.1) m за AERMOD
Диаметър на отвора (D)	1.575 m (TRACE, AERMOD)
Обемен поток на замърсителя (Q _v)	0.4 m ³ s ⁻¹ (ALOHA, AERMOD)
Масов поток на замърсителя (Q _m)	0.5 kg s ⁻¹ (TRACE, AERMOD)
Температура на изходящия газ (T)	293.15K
Рецептори	
Местоположение	Взети от базата данни и преизчислени, за да съответстват на местоположението на източника (ALOHA, TRACE); приети без нужда от преизчисляване (AERMOD)
Височина над земната повърхност (H)	7.5 m за TRACE и AERMOD, и 0.0 m за ALOHA
Начало на координатната система	ALOHA и TRACE: Съвпада с източника; AERMOD: (x,y) = (0.0, 0.0) m – в центъра на моделираната област
Метеорологични данни	
Скорост на вятъра на височина 9 m (U)	2,7 ms ⁻¹
Посока на вятъра на височина 9 m	270.0° (тестове за чувствителност: -5°, +5° – завъртане по и обратно на часовниковата стрелка спрямо направление 270° съответно)
Температура на въздуха на 2 m (T _{2m})	293.15 K
Относителна влажност (RH)	50 %
Параметър на грапавост (z ₀)	0.8 m (тестовите за чувствителност в интервала 0.8 – 1.2 m не дават почти никаква разлика в моделните резултати)
Клас на стабилност по Пасквил Височина на температурната инверсия	D (Неутрална стратификация)(ALOHA, TRACE) Зададена като "No inversion" (ALOHA, TRACE)
Динамична скорост (u _*)	0.4 ms ⁻¹ (AERMOD) (тестове за чувствителност с модела са правени за u _* = 0.35, 0.4, 0.45, 0.5 и 0.566 m s ⁻¹ съответно)

Стойността на скоростта на вятъра от 2.7 m s^{-1} (на референтна височина 9 m, в пълен мащаб) е взета от базата данни с вертикални профили на вятъра, разположени в домейна "Michelstadt" с координати (-450, 112,5) (местоположението на "Profile 2" е обозначено със синьо квадратче на Фиг. 5). Тази точка е избрана като най-представителна за метеорологичните данни, тъй като се намира в рамките на домейна и посоката на вятъра в тази точка не се влияе пряко от разположените в близост сгради. Друго предимство е, че точката е в близост до източника "S2" (координати -361,9, 125,1).

AERMOD изисква данни за вертикалния профил на вятъра и температурата в отделен файл (напр. "aermod.pfl"). Профилът може да се състои от данни, които са ограничени до един слой (напр. температурата и вятърът само на височина 2 m), но колкото по-подробни са данните (ако са налични), толкова по-точни ще бъдат резултатите.

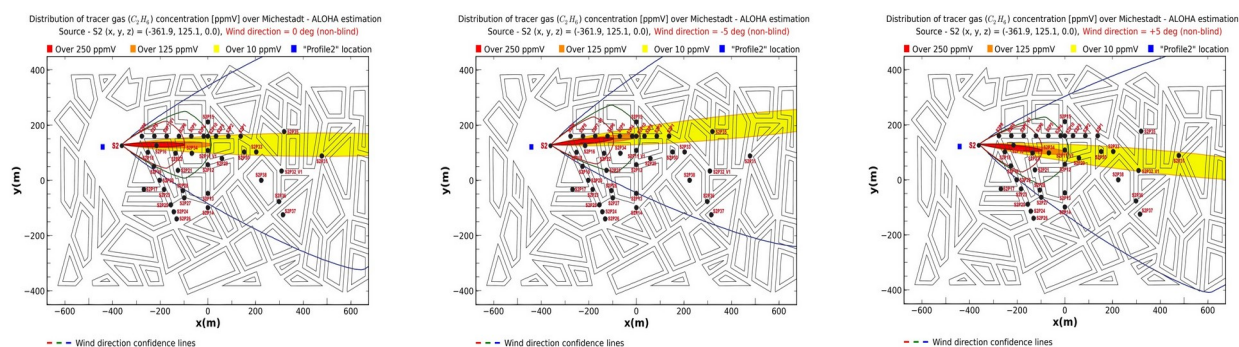
3.2.2. Числени пресмятания

Разработени за реагиране при извънредни ситуации, ALOHA и TRACE дават почти мигновени резултати за произволен рецептор, когато работят на машина с двудрен i3 процесор и с 4 GB RAM. И двата модела работят под Windows OS. AERMOD, в този случай, също дава незабавен резултат, с тази разлика, че моделът позволява задаване на рецепторна мрежа с произволна резолюция, а броят на дискретните рецептори, които могат да бъдат определени, може да бъде практически неограничен. Тъй като моделът е предназначен за регулаторни цели, той има някои ограничения при използването му като инструмент за ранно предупреждение: не може да обработва краткотрайни (тип облак) изпускания на замърсител, тъй като минималната му времева разделителна способност е 1 час, а подготовката на файловете с входни данни изисква време.

4. Резултати и коментари

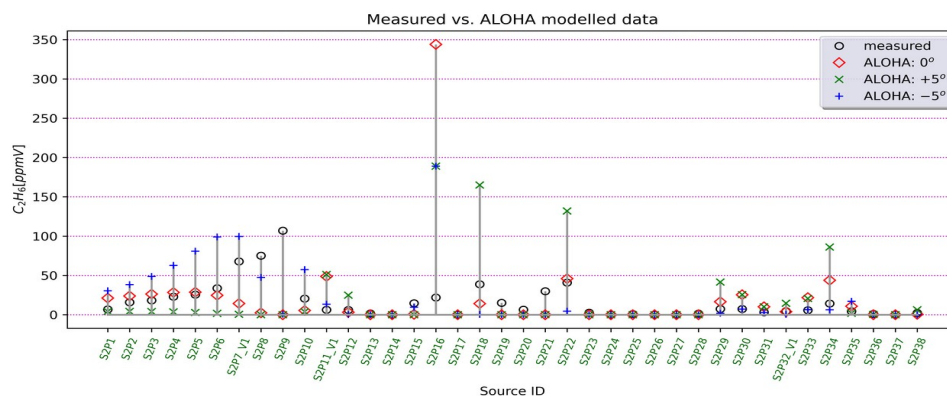
4.1. ALOHA

На Фиг. 5 са показани полетата на замърсяване получени с ALOHA при непрекъснато действащ източник, за посоки на вятъра 0° , -5° и $+5^\circ$. Контурните линии, оцветени в червено, зелено и синьо, са т. нар. доверителни граници. Те показват възможната средна концентрация на замърсителя в оградената от тях зона, в случай че се появят колебания в посоката на вятъра в интервала $\pm 30^\circ$.



Фиг. 5. Тестове за чувствителност към посоката на вятъра: полета на концентрацията на C_2H_6 , моделирани от ALOHA, за посоки на вятъра 0° (ляво), -5° (средата) и $+5^\circ$ (дясно).

Сравнението между изображенията, които показват разпределението на замърсителя, разкрива висока чувствителност на модела към промяна на посоката на вятъра.



Фиг. 6. Сравнение между моделираните от ALOHA (посоки на вятъра 0°, +5° and -5°) и измерените в аеродинамичния тунел концентрации на C₂H₆ [ppmV], за случая с непрекъснато действащ източник “S2”.

Тестовите за чувствителност към посоката на вятъра +5° и -5° показват идентични резултати в точка S2P16, поради симетрията на разпределението спрямо централната линия на струята. Големите разминавания между моделирани и измерени концентрации в някои от точките се дължи главно на неспособността на модела да отчита влиянието на сградите върху разпространението на замърсителите.

Една от най-полезните изходни характеристики на модела ALOHA, са границите на доверителност на посоката на вятъра. Макар и непряко, те могат да покажат, че например, точка S2P9 може да попадне в зона с концентрация на замърсители, надвишаваща 250 ppmV. Т.е. дори моделът да симулира ниска спрямо измерената концентрация, гледайки доверителните граници тази точка следва да се разглежда като такава с потенциално високи концентрации.

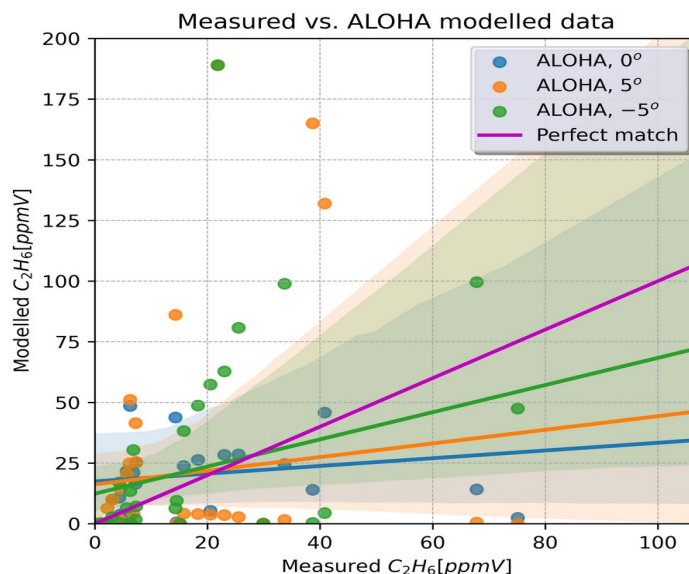
На Таблица 2 са дадени стойностите на статистическите параметри (подробно описани в раздел II) за оценка на резултатите от ALOHA, използвани в рамката на COST Акция ES1006. Стойностите са усреднени за всички рецепторни точки.

Таблица 2: Стойности на статистическите параметри приложени за оценка на ALOHA

Стат. параметър	Посока на вятъра	0°	-5°	+5°
NMSE		10.23	4.22	6.62
R		0.06	0.32	0.14
FB		-0.19	-0.27	-0.23
FAC2 (%)		21.05	15.79	2.63

И в трите случая, R и FAC2 са с много ниски стойности, но FB влиза в границите зададени от Hanna и Chang (2012) ($|FB| < 0.3$). NMSE < 6.0 само за случая на завъртане на посоката на вятъра с -5°. При такива резултати, определянето на „най-точно“ съвпадение между измерени и моделирани концентрации, само на базата на използваните статистически показатели, не е

достатъчно. Затова, в помощ на оценката е конструирана и диаграмата на разсейване (Фиг. 7) с регресионни линии предполагащи линейна зависимост между измерените и моделираните концентрации.



Фиг. 7. Диаграма на разсейване на моделираните от ALOHA и измерените в аеродинамичния тунел стойности на концентрациите на C_2H_6 . Точките от тестовете с посоки на вятъра -5° , 0° и 5° са дадени в зелено, циан и оранжево, съответно.

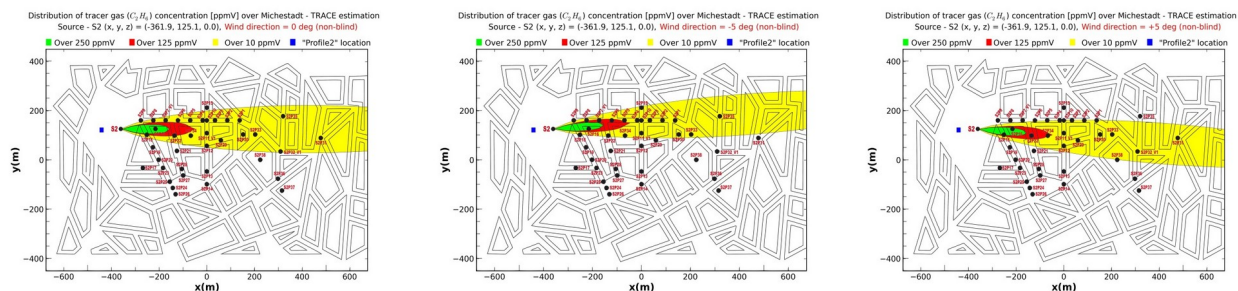
Както се вижда на фигурата, правата отговаряща за посока на вятъра -5° (в зелен цвят) сключва най-малък ъгъл с тази на идеалното съвпадение (в магента). Имайки предвид Фиг. 7 и стойностите в Таблица 2, можем да направим извода, че случаят с посока на вятъра -5° дава най-добрия възможен резултат.

4.2. TRACE

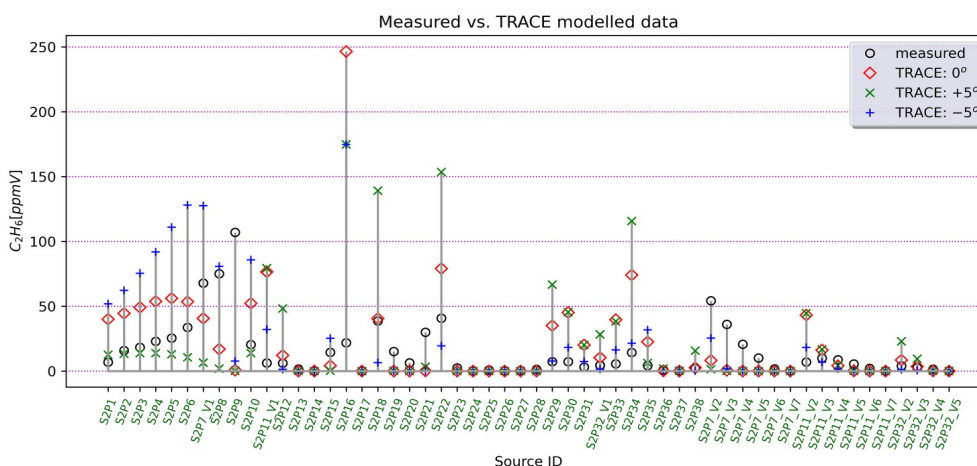
На Фиг. 8 са дадени моделираните от TRACE полета на замърсяване, за трите посоки на вятъра – 0° (ляво), -5° (средата) и 5° (дясно). За разлика от ALOHA, TRACE дава изход от моделиране на дисперсията на замърсители за хоризонтална равнина, разположена на произволна височина (ALOHA може да прави това само за $z = 0.0$ m). Цветовата скала на фигурата е избрана да съответства на заложената в графичния интерфейс на модела.

Както се вижда (Фиг. 8), струята моделирана от TRACE, е малко по-широка от тази, която е моделирана с ALOHA. На сравнителната диаграма с измерените концентрации (Фиг. 9), обаче се наблюдават почти същите особености на изчислените концентрации. Рецепторната точка S2P9 остава далеч от прякото въздействие на струята във всички случаи, като изчислената концентрация на замърсителя там са близки до 0 ppmV, а максимумът на изчислената концентрация на C_2H_6 е в рецептор S2P16, когато посоката на вятъра е 0° . В S2P16 моделираните концентрации при посоки на вятъра $+5^\circ$ и -5° са равни, т.е. имаме същата симетрия на разпределение на моделираното замърсяване, както при ALOHA. И тук, в случая с посока на вятъра -5° имаме най-висок коефициент на корелация (R) и най-ниска нормализирана средна квадратична грешка (NMSE) (Таблица 3). Вземайки предвид

съображенията от сравненията в предната секция (ALOHA), можем да направим аналогичен извод за резултатите използвайки диаграмата на разсейване (Фиг. 10) и тук.



Фиг. 8. Тестове за чувствителност към посоката на вятъра: полета на концентрацията на C_2H_6 , моделирани от TRACE, за посоки на вятъра 0° (горе), -5° (средата) и $+5^\circ$ (долу).

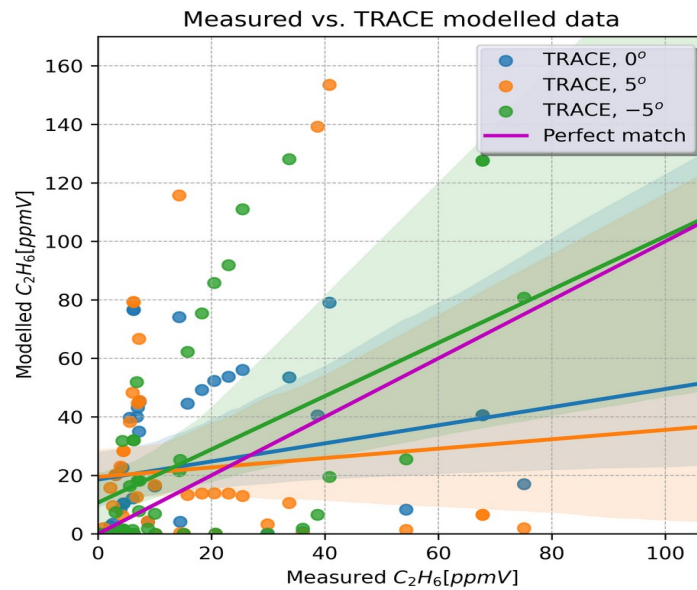


Фиг. 9. Сравнение между моделираните от TRACE (посоки на вятъра 0° , $+5^\circ$ and -5°) и измерените в аеродинамичния тунел концентрации на C_2H_6 [ppmV], за случая с непрекъснато действащ източник "S2".

Таблица 3. Стойности на статистическите параметри приложени за оценка на TRACE

Стат. параметър	Посока на вятъра	0°	-5°	$+5^\circ$
NMSE		4.83	3.77	5.71
R		0.17	0.47	0.09
FB		-0.41	-0.47	-0.35
FAC2 (%)		15.79	12.28	17.54

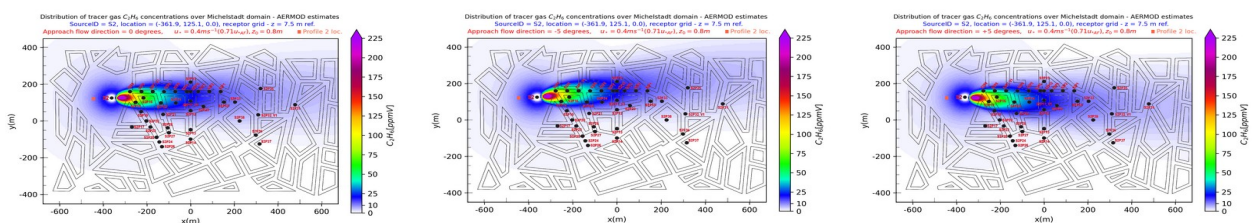
Сравнявайки резултатите от ALOHA и TRACE (Фиг. 6 и Фиг. 9) можем да видим сходни характеристики в моделираното разпределение на замърсяването.



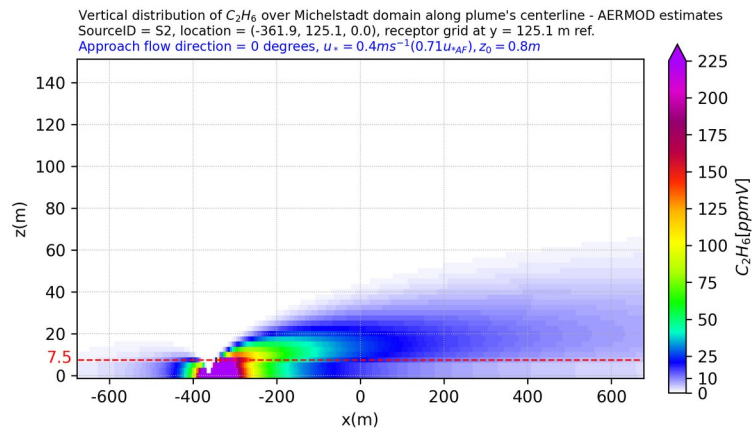
Фиг. 10. Диаграма на разсейване на моделираните от TRACE и измерените в аеродинамичния тунел стойности на концентрациите на C_2H_6 . Точките от тестовете с посоки на вятъра -5° , 0° и 5° са дадени в зелено, циан и оранжево, съответно.

4.3. AERMOD

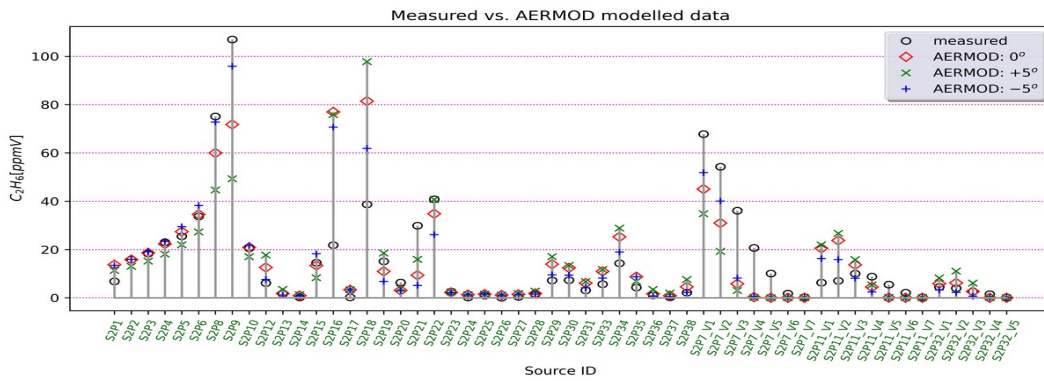
Единствената по-специфична информация, която ALOHA и TRACE изискват за вятъра, е височината, на която той е измерен. За референтна е избрана стойността от 2.7 m s^{-1} измерена на 9 m височина (приведена в пълен мащаб) в точка „Profile 2“ (Таблица 1). За да даде максимално точни резултати, AERMOD трябва да бъде захранен с колкото се може по-изчерпателна информация, която включва вертикални профили на вятъра и температурата, както и величини като, например, динамичната скорост. Липсата на данни за вертикалните турбулентни потоци в “Profile 2”, чрез които u_* може да бъде изчислена, налага с модела да се проведат допълнителни тестове за чувствителност, за различни стойности на u_* и z_0 . За най-удачни са приети стойностите $u_* = 0.4 \text{ ms}^{-1}$ и $z_0 = 0.8 \text{ m}$.



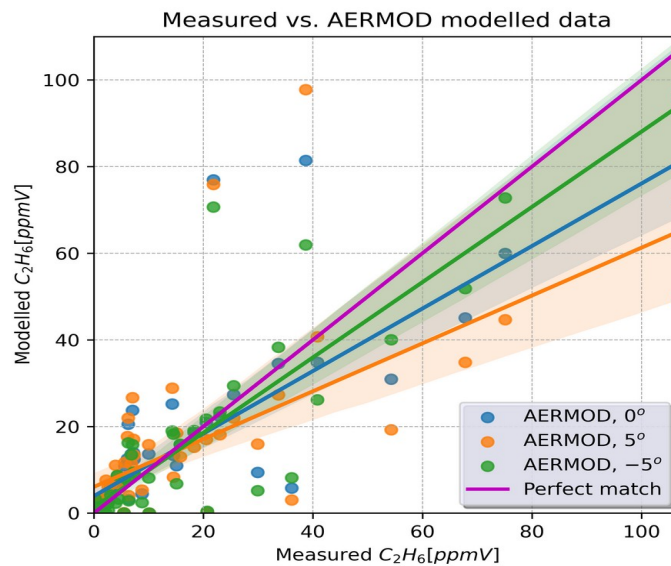
Фиг. 11. Тестове за чувствителност към посоката на вятъра: полета на концентрацията на C_2H_6 , моделирани от AERMOD, за посоки на вятъра 0° (горе), -5° (средата) и $+5^\circ$ (долу).



Фиг. 12. Вертикален разрез на моделираното от AERMOD поле на замърсяване, за случая с посока на вятъра 0° . Разрезът е по централната линия на струята. С червена пунктирна линия е отбелязано нивото на рецепторната мрежа в хоризонталната равнина.



Фиг. 13. Сравнение между моделираните от AERMOD (посоки на вятъра 0° , $+5^\circ$ and -5°) и измерените в аеродинамичния тунел концентрации на C_2H_6 [ppbV], за случая с непрекъснато действащ източник "S2".



Фиг. 14. Диаграма на разсейване на моделираните от AERMOD и измерените в аеродинамичния тунел стойности на концентрациите на C_2H_6 . Точките от тестовете с посоки на вятъра -5° , 0° и 5° са дадени в зелено, циан и оранжево, съответно.

На *Фиг. 11* са представени моделираните от AERMOD полета на замърсяване – за посоки на вятъра 0° (ляво), -5° (средата) и +5° (дясно). Тъй като източникът на трасиращия газ е разположен на земята (на ниво $z = 0,0$ m), а нивото на рецепторната мрежа е на 7,5 m, в мястото на източника се наблюдава бяло петно – там липсва замърсяване, поради спецификата на разпределението на моделираните концентрации, чийто вертикален разрез може да се види на *Фиг. 12*.

Разликите между моделираните от AERMOD полета на замърсяване и тези от другите два модела са значителни и могат лесно да бъдат забелязани. В представените от AERMOD полета на *Фиг. 11*, голяма част от замърсителя се разпространява по посока на вятъра, но има и част, която се разсейва във всички останали направления. Моделът отчита триенето генерирано от земната повърхност, което нарушава и забавя преноса на замърсителя в близост до земята, което води до образуване на струя с неправилна форма във вертикалната равнина (*Фиг. 12*). Диаграмата на *Фиг. 13* показва добро съвпадение между наблюдаваните и моделираните концентрации, особено за случая с посока на вятъра -5°, което се потвърждава от стойностите на статистическите параметри дадени на *Таблица 4*, както и от диаграмата на разсейване (*Фиг. 14*).

В сравнение с ALOHA и TRACE AERMOD показва значително по-ниска чувствителност към промяна на посоката на вятъра. Главната причина за това е представената от модела по-голяма дисперсия в странично (перпендикулярно на централната линия на струята) направление.

Таблица 4. Стойности на статистическите параметри приложени за оценка на AERMOD

Стат. параметър	Посока на вятъра	0°	-5°	+5°
NMSE		0.88	0.85	1.45
R		0.76	0.86	0.61
FB		0.01	0.05	0.04
FAC2 (%)		51.85	55.56	40.74

В заключение, за проведените сравнителни изследвания с три Гаусови модела, може да се обобща, че и трите изискват малък изчислителен ресурс. Това е предопределящо за широкото им приложение и в днешно време. От статистическа гледна точка, обаче, моделираните от ALOHA и TRACE концентрации твърде много се различават от реално измерените в аеродинамичния тунел. Въпреки това, ALOHA и TRACE, с известни резерви, биха могли да се използват като инструменти за ранно предупреждение в гъсто застроена среда, особено в случаите, когато се прилагат в райони, където преобладава броят на сградите с един до три етажа.

AERMOD показва много добри резултати в това конкретно проучване. Моделът задоволява дори по-строгите критерии, използвани в практиката на COST 732: $|FB| < 0.3$; $NMSE < 1.5$ и $FAC2 \geq 0.5$ (Jeanjean et al., 2015) и в трите представени теста за чувствителност.

5. Обобщение и изводи

Направените тестове и анализи показват, че изследваните Гаусови модели могат да бъдат приложени за градска среда: ALOHA и TRACE – по предназначение и с уговорката, че дават големи отклонения в резултатите, а AERMOD – за регулаторни цели и като модел за ранно предупреждение при положение, че е предварително настроен за съответния район.

IV. Лагранжеви дисперсионни модели. Моделиране на дисперсията на замърсители с модела GRAL

1. Понятие за Лагранжев дисперсионен модел. Съвременни представители, техните възможности, производителност и приложения

Лагранжевите модели симулират дисперсията като движение на обеми флуид, които носят част или цялото количество субстанция изхвърлено от даден източник на замърсители. Те могат да бъдат разделени на Лагранжеви облачни (“пуф”, англ. *puff*) модели (ЛППМ) и Лагранжеви частичкови модели (ЛЧМ) (Zanetti, 1992).

Този тип модели намират широко приложение в Европа след 1970-1980, за моделиране на пренос на замърсители на големи разстояния и депозиция на киселяващи вещества, като основният разглеждан замърсител са серни съединения. Някои от по-популярните Лагранжеви модели са разработваният от началото на 90-те години модел FLEXPART (**FLEX**ible **PART**icle)(Stohl et al., 1998), RELMAP (**R**egional **L**agrangian **M**odel of **A**ir **P**ollution)(Eder, 1986), LPD (**L**agrangian **P**article **D**ispersion) (Plainiotis, 2005), AUSTAL2000 (Janicke and Janicke, 2007) и LASAIR (<https://www.janicke.de>). Моделната система GRAMM/GRAL е усъвършенствана за изчисляването на атмосферното замърсяване в условия на безветрие. GRAL е и моделът, който ще разгледаме по-подробно в тази глава.

2. Описание на моделната система GRAMM/GRAL

GRAL (**G**raz **L**agrangian **M**odel) е Лагранжев дисперсионен модел, създаден през 1999 г. в Технически Университет – Грац, Австрия, където се използва широко за регулаторни цели и научни изследвания (Oettl, 2019). Основна причина за създаването на модела са проблемите възникващи от честите епизоди на застой на атмосферни замърсители в планинските долини на Австрия, където в 90% от наблюдаваните случаи скоростта на вятъра не превишава 1.5 m s^{-1} (Lazar, 1999). Аналогични ситуации се наблюдават и в нашата страна – особено по котловинните полета, което е причина да се спрем на този модел. GRAL е част от системата GRAMM/GRAL. GRAMM (**G**raz **M**esoscale **M**odel) е мезомащабен прогностичен модел, който изчислява полета на вятъра, отчитайки влиянието на релефа върху въздушния поток. Изходящата информация от GRAMM след това се усвоява от GRAL. Моделната система е проектирана за работа при всякакъв тип устойчивост на атмосферата. Изходните резултати са полета на концентрации, усреднени за минимум 1 час.

В представените по-долу изследвания GRAMM не се използва и симулациите са зададени за равен терен. В GRAL е наличен вграден микромащабен (CFD) модел, който отчита влиянието на сградите и растителната покривка. Лагранжевият модул, който се явява главното ядро на моделната система, изчислява:

- Дисперсия на химически неактивни замърсители;
- Разпространение на миризми;
- Суха и мокра депозиция и седиментация;
- Дисперсия на замърсители от вход/изход на тунели;
- Дисперсия на замърсители за широк диапазон скорости на вятъра, без долна граница и за всички класове на устойчивост;
- Разпространение на замърсители със зададено от потребителя време на живот (прилага се за радиоактивни вещества, бактерии и др.).

Моделът използва 7 степенна модификация на класовете на устойчивост по Pasquill-Gifford (Pasquill, 1961; Gifford, 1976), която е строго определена и не може да се променя от потребителя. По принцип, за целите на атмосферните дисперсионни модели (АДМ), такъв тип стратификационни схеми работят добре.

В изследванията представени тук, е използван само GRAL. Полетата на вятъра са изчислени с вградения CFD модул в прогностичен режим.

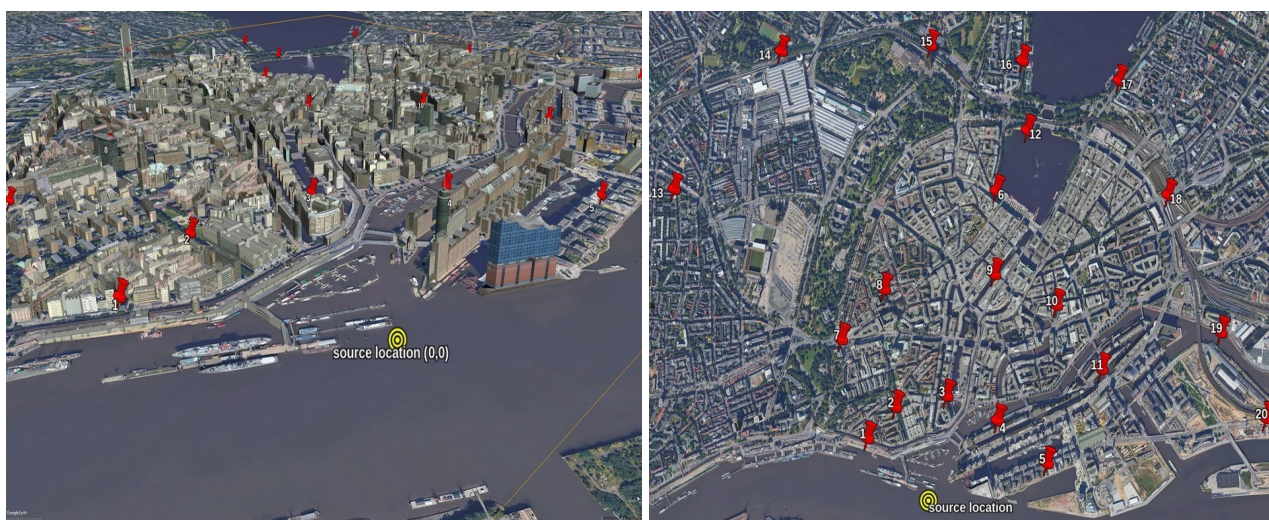
3. Тестове и оценка на работата на Лагранжевия модел GRAL

3.1. Тестове с полеви измервания от “Експеримент в комплексна градска среда” (The Complex Urban Terrain Experiment – CUTE, COST ES1006)

Цел на задачата. Дадените в следващите секции сравнения между представените от модела резултати и тези от полевите измервания не са опит за валидация. В тестовия пакет CUTE-1, обаче са налице някои преднамерени ограничения, засягащи главно наличността на изчерпателна метеорологична информация. Целта на тези ограничения е да се изпита работата модела като инструмент за ранно предупреждение. Поради тази причина, като метеорологичен вход са дадени само посоката и скоростта на вятъра, температурата, атмосферното налягане и класа на стабилност. По този начин се проверяват експлоатационните качества на модела, принуждавайки го да оперира с минимално количество входящи данни.

3.1.1. Описание на базата данни от полеви измервания

Експерименталната база данни CUTE (Complex Urban Test Experiment) включва резултати от полеви измервания в Хамбург, Германия и такива проведени в аеродинамичен тунел (COST ES1006, 2015). Първият сценарий (Сценарий 1, Case 1) от CUTE е полеви експеримент, проведен в гъсто застроената централна част на града, където типичната височина на сградите е между 25 и 35 m. Хамбург е разположен на преобладаващо равнинен терен, т.е. в рамките на областта на моделиране липсват възвишения, които биха оказали съществено влияние върху полето на вятъра. На *Фиг. 15* (ляво) е показано триизмерно изображение на изследваната област.



Фиг. 15. Област на моделиране – гъсто застроената централна част на Хамбург, Германия (ляво); Местоположения на източника и пробовземачите устройства (дясно). (Източник: Google Earth)

Източникът на замърсяване при този сценарий е разположен на лодка. Използваният тестов замърсител е пасивен трасер – серен хексафлуорид (SF_6), който се изпуска в продължение на 45 минути (2700 s) с мощност 2 g s^{-1} . В рамките на областта на моделиране трасерът се засича от 20 пробовземачи устройства. Всяко устройство има прикачени 9 балона, които се пълнят последователно – всеки за период от 10 min. По този начин, взетата проба във всеки балон представя 10 минутна средна концентрация на SF_6 . На Фиг. 15 (дясно) са показани точките на пробовземане, разположени под формата на три дъги, отдалечени на различни разстояния от източника.

Въпреки че продължителността на действието на източника е 45 минути, измерванията се провеждат до 90-тата минута след началото на изпускането на тестовия замърсител. С цел повишаване на времето разрешение на измерванията, в пунктовете разположени най-близо до източника, интервалите на взимане на проби се застъпват. На Таблица 5 е показана последователността, по която се осъществяват измерванията, за всички 20 пункта.

По време на експеримента, вятърът измерен на 175 m над земната повърхност е югозападен (219°), със средна скорост 8.9 ms^{-1} . Атмосферната стратификация е неутрална. В точката на изпускане на SF_6 , атмосферното налягане е 1009.65 hPa, а температурата на въздуха – 285.6 K (12.5°C).

Таблица 5. График на пробовземанията по време на полевия експеримент CUTE-1.

Пробовземачо устройство	Период на пробовземане (в минути – след началото на изпускане на SF_6)								
	Балон 1	Балон 2	Балон 3	Балон 4	Балон 5	Балон 6	Балон 7	Балон 8	Балон 9
S1 – S5	0 – 10	5 – 15	10 – 20	15 – 25	20 – 30	25 – 35	30 – 40	35 – 45	40 – 50
S6 – S12	0 – 10	7 – 17	19 – 29	26 – 36	33 – 43	40 – 50	47 – 57	54 – 64	61 – 71
S13 – S20	0 – 10	10 – 20	20 – 30	30 – 40	40 – 50	50 – 60	60 – 70	70 – 80	80 – 90

3.1.2. Подготовка на модела – настройки, тестове и експлоатационни качества

3.1.2.1. Входяща информация

Според даденото в Таблица 5, за сравнение се изискват последователно подредени 10 минутни средни концентрации, но за GRAL това е възможно само за първата времева рамка (от 0 до 10 минути). Причина за това, е невъзможността да се извлекат от модела средни стойности по интервал, чието начално време не съвпада с кръгъл час (например – снемане на 10 минутни средни концентрации за интервала 12:10 – 12:20 UTC, при положение, че е възможно начало на симулацията само в 12:00 UTC). Независимо от това, симулациите са осъществени с настройки и по начин, които съответстват максимално на графика в таблицата, с тази разлика, че GRAL винаги изчислява дисперсията, започвайки от минута 0. Това е постигнато посредством вградения режим за единични случаи, който позволява на модела да изчислява еволюцията на струята във времето и пространството. Като се има предвид това, трябва да се отбележи, че сравнението на моделираните с 10 минутните усреднени експериментални данни би било до известна степен неточно.

Максималният времеви интервал на усреднение при серията от симулации е определен на 2700 s (45 минути), което съответства на продължителността на емисиите. След изтичането на този период източникът прекратява емисиите си и се приема, че след 90 минути замърсителят ще бъде напълно евакуиран от областта на моделиране. На този етап (периодът от време между 2700 s и 5400 s) провеждането на симулация би било безсмислено, тъй като при гореописаната конфигурация изчислението на дисперсията би довело до празно (с нулеви стойности) поле на концентрацията.

3.1.2.2. Числени пресмятания

Тестовите са проведени на преносим компютър HP ProBook 450-G2 със следните технически характеристики:

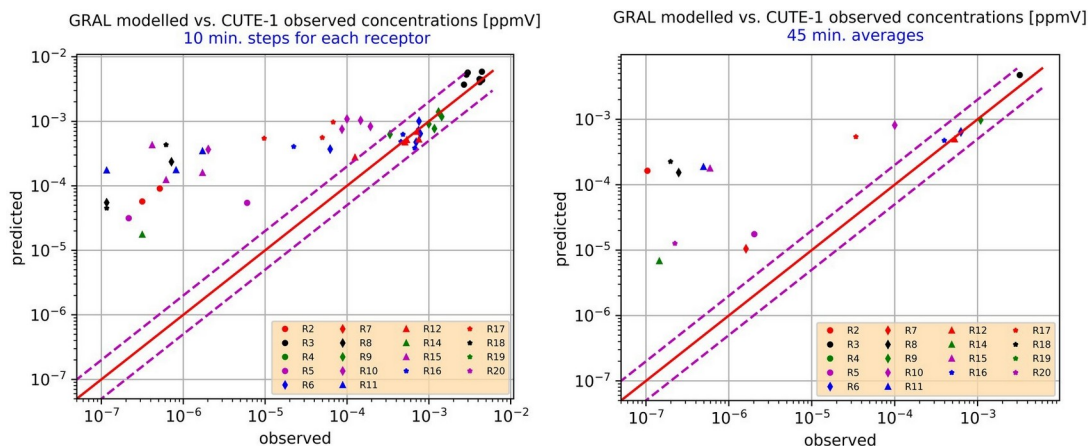
- Процесор: Intel Core i7-4510U – 2 ядра, 4 нишки, 2 GHz;
- Оперативна памет: 16 GB RAM;
- Операционна система: Ubuntu Linux 18.04.1, 64bit.

GRAL поддържа паралелни изчисления, което означава, че решаването на задачи от типа на CUTE Case 1 на работна станция с многоядрен процесор ще отнеме само няколко минути. Това означава, че е възможно моделът да се прилага и като инструмент за ранно предупреждение. В случая – с гореописаната компютърна конфигурация, времето за изчисление е около 2600 s.

3.1.3. Резултати и коментари

Диаграмите на разсейване на Фиг. 16 показват много добро съответствие между моделираните и наблюдаваните концентрации за рецепторите, които се намират на централната линия на струята (R3, R6, R9, R12 и R16), леко завишени моделирани стойности за рецепторите в близост до тях (R5, R7, R10, R17), докато за останалите рецептори (с изключение на R1 и R13) се наблюдава значително надвишаване на моделираните спрямо измерените стойности. Това показва тенденция към по-равномерно разпределение на моделираните концентрации на замърсител в струята, с отдалечаването от източника. Причина за това може да бъде представената от модела по-голяма дисперсия в странична посока, но това не обяснява, защо в такава ситуация рецепторите R1 и R13 остават извън

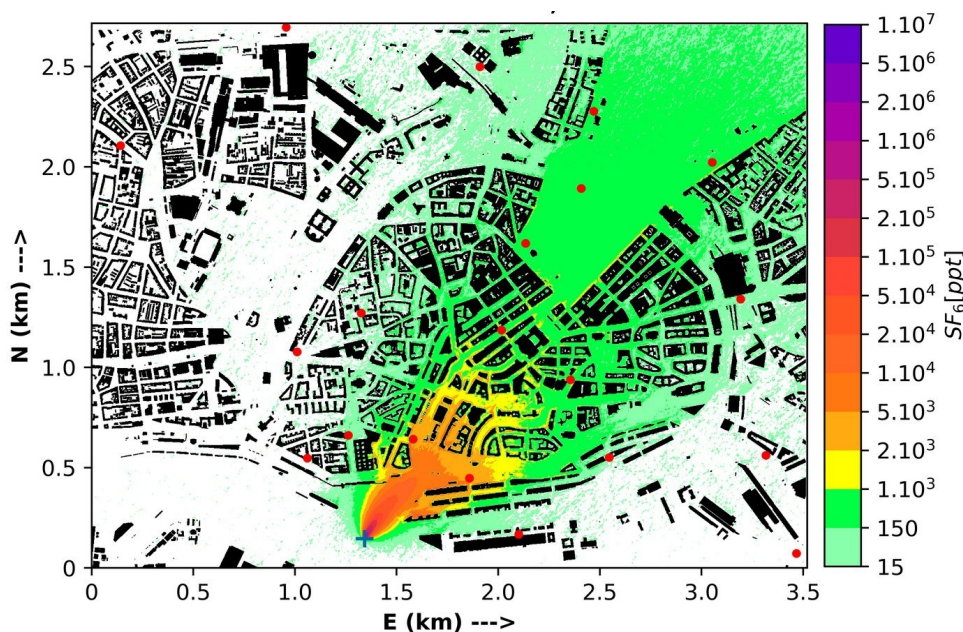
действието на основния поток от замърсител, въпреки страничното си отдалечено местоположение, докато R5 и R20, които са симетрично разположени спрямо R1 и R13, показват много по-високи моделирани концентрации.



Фиг. 16. Сравнение между моделираните и измерените концентрации на SF_6 за всеки отделен рецептор, по определения в Табл. 5 график (ляво) и по средни за времето на действие на източника (2700 s) стойности (дясно).

Картата на разпределение на замърсяването на Фиг. 17, обаче разкрива, как спецификата на застроената зона, съчетана с посоката на вятъра, принуждава част от замърсителите да се движат по траектория с преобладаваща западна компонента. Следователно при такива условия рецепторите R5 и R20 са подложени на въздействието на източника, докато R1 и R13 остават почти незасегнати.

Като показател за качеството на моделните резултати тук се използват два статистически параметъра: нормализираната средна квадратична грешка (NMSE) и относителното отклонение (FB).



Фиг. 17. Разпределение на концентрацията на SF_6 в изследваната област, в момент $t = 2700s$. Източникът на тестов замърсител е обозначен със синьо кръстче, а рецепторите – с червени точки.

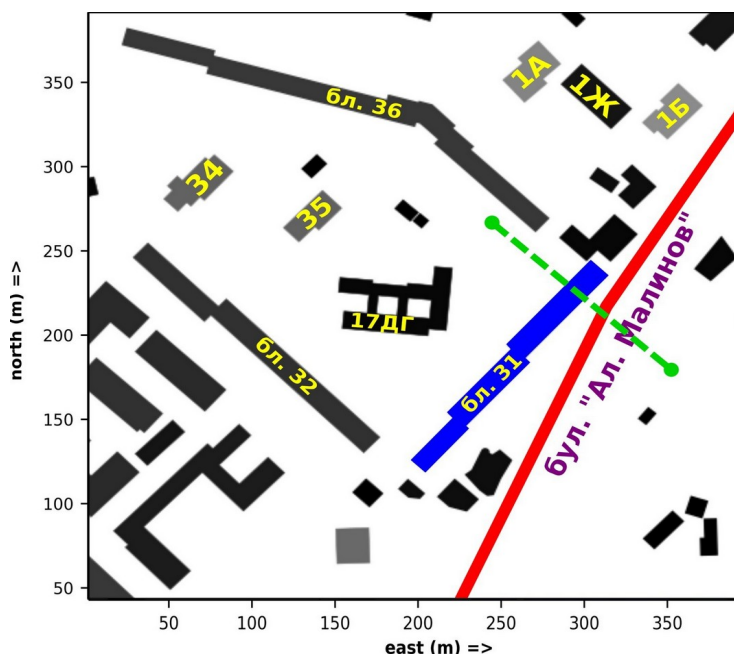
За 10-минутната времева редица $FB = -0.77$, $NMSE = 4.84$, а за целия 45-минутен период $FB = -0.70$ и $NMSE = 4.27$. Според актуализирано изследване на Hanna и Chang (2012), критериите за добри моделни резултати относно дисперсия на замърсители при аварии в застроена градска са $|FB| < 0,67$ и $NMSE < 6$. Получените при тези тестови симулации отрицателни стойности на FB показват завишени моделирани концентрации.

3.2. Моделиране разпределението на замърсители около сгради в район от гр. София при различни метеорологични условия

Целта на това изследване е да покаже как GRAL симулира разпределението на замърсители в микромащаб.

3.2.1. Описание на избрания район. Входни данни

За целта на изследването е избрана част от ж.к. "Младост" - 1, гр. София (Фиг. 18), която включва конфигурация от жилищен блок (бл. 31) и намираща се в непосредствена близост част от натоварена пътна артерия (бул. "Ал. Малинов"), разположена почти успоредно на блока. Областта на моделиране е с размери $400 \times 400 \times 200 \text{ m}$ (по x , y и z съответно). Зелената пунктирна линия на Фиг. 18 обозначава сечението, в което се разглеждат вертикалните разпределения на концентрациите на замърсителите. Стъпката на изчислителната мрежата е 2 m във всички посоки.



Фиг. 18. Избрана област на моделиране от ж.к. Младост -1, гр. София. Със зелен пунктир е отбелязана линията на сечение, по която се разглеждат вертикалните разпределения на концентрациите на азотен диоксид.

Като източник на замърсители в района разглеждаме движението на МПС по бул. „Ал. Малинов“, а като "тестов замърсител" се спираме на азотния диоксид (NO_2), който е най-тясно свързан с емисии от трафика. В случая, булевард "Ал. Малинов" се разглежда като постоянно действащ линейен източник на NO_2 с мощност $0.0278 \text{ g s}^{-1} \text{ m}^{-1}$ ($100 \text{ kg h}^{-1} \text{ km}^{-1}$). Тази стойност на емисиите е определена по емпиричен път, чрез метод, който тук ще наречем

адаптиращ. При този метод се правят сравнения между данните от една измервателна точка в близост до пътната артерия и изчисленията от модела за тази точка, при различни стойности на емисиите. Когато се достигне до минимална разлика или съвпадение между измерените и моделираните концентрации, се приема, че използваната стойност на емисиите максимално се доближава до действителната. За целите на изследването, емисиите от бул. „Ал. Малинов“ са адаптирани към средната от измерените от намиращата се на територията на НИМХ АИС “Младост – 1” максимални дневни концентрации на NO₂ за периода 2016 – 2017г (70.2 µg m⁻³). Тази стойност е избрана с допускането, че е типична за ситуации с понатоварено движение.

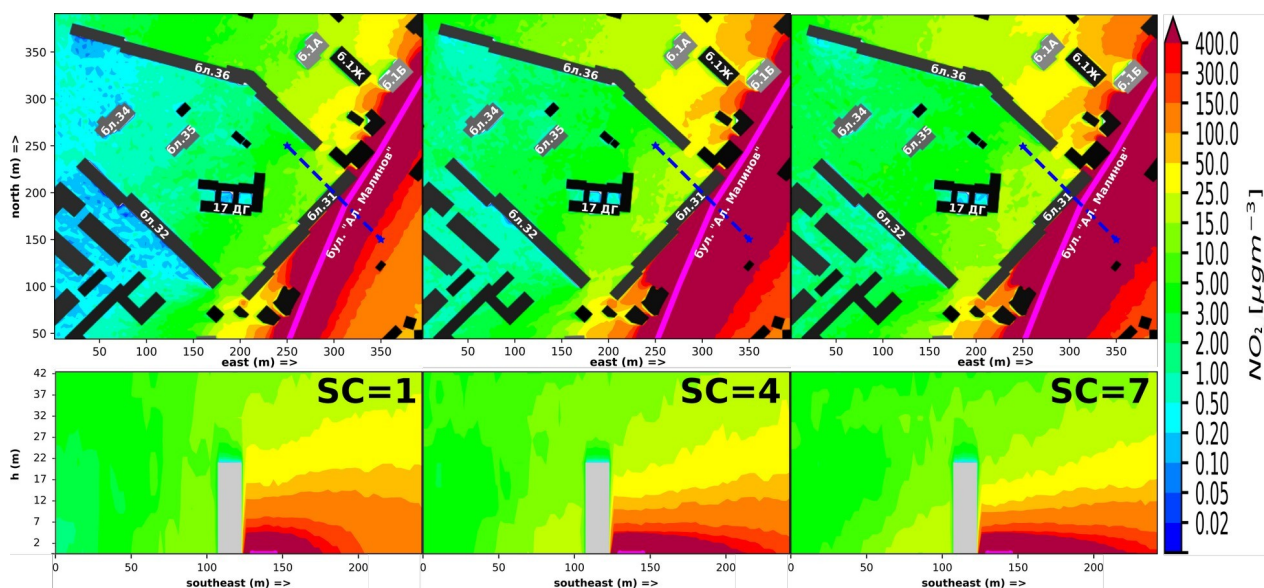
Съобразено с ориентацията на бл. 31 са приложени 4 различни посоки на вятъра, като височината, на която той е зададен, е 10 m. В два от изследваните случаи направлението му е по дължината (успоредно) на блока (югозападен и североизточен вятър), а в другите – перпендикулярно, по линията на сечение (северозападен и югоизточен вятър). За всеки от гореизброените случаи са проведени симулации при условия на безветрие и при скорости на вятъра от 3 и 7 m s⁻¹, при класове на устойчивост 1, 4 и 7, отговарящи съответно на силно неустойчива, неутрална и силно устойчива температурна стратификация. Тук следва да се отбележи, че не всички комбинации от клас на устойчивост и скорост на вятъра са възможни в действителност. При пълно безветрие, например, могат да се реализират всички класове. С увеличаване на скоростта на вятъра, обаче идва момент, в който динамично генерираната турбулентност започва за взима превес над термично генерираната такава – зависимост, която добре се описва от теорията на подобие на Монин-Обухов (Сираков, 2011). При скорост на вятъра от 7 m s⁻¹ в това изследване, смесването в хоризонтално и вертикално направление е добре изразено, което води до изравняване на температурите във всички части на подслоя на грапавост в градския АГС. При такива условия е възможна само неутрална температурна стратификация (клас на устойчивост 4). В настоящия случай, обаче се разглеждат въздействия от микромащабен характер – такива, които се ограничават основно в слоя на градските неравности. CFD модула на GRAL може да пресметне поток обтичащ дадена конфигурация от сгради, но доколко температурната стратификация изразена чрез клас на устойчивост може да бъде уловена от модела в такъв мащаб, само резултатите от числения експеримент могат да покажат. Именно заради това са приложени всички възможни комбинации от дадените скорости на вятъра и класове на стабилност – за да се провери, дали и доколко GRAL отчита тези зависимости.

3.2.2. Резултати и коментари

На *Фиг. 19* са показани изчисленията от модела хоризонтални полета на височина 2 m на средночасови концентрации на азотен диоксид (горния ред) и вертикалните разрези (долния ред) в условия на безветрие, при класове на устойчивост 1 (ляво), 4 (средата) и 7 (дясно).

Резултатите в този конкретен случай ясно показват по-голямо разпространение на замърсител във вертикална посока, когато е налице силна неустойчивост. За краткия период от 1 час жилищният блок се явява като добра преграда от проникване на NO₂ във вътрешността на района, където се намира и 17 ДГ "Мечо Пух". При класове на устойчивост 4 и 7 разликите в пространственото разпределение на замърсителя са по-малки, тъй като в такъв мащаб и в дадения случай и при неутрална, и при устойчива стратификация

моделираното смесване в приземния слой има близки по значение стойности. В този случай, моделът, съобразявайки подадената информация превключва от предварително зададения клас 4 към клас 6 - 7, т.е. GRAL успешно коригира класа на устойчивост, според зададената скорост на вятъра.



Фиг. 19. *Хоризонтални полета на средночасови концентрации на NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) на височина 2 m (горе) и вертикални разрези (долу) в условия на безветрие, при класове на стабилност $SC = 1$ (ляво), $SC = 4$ (средата) и $SC = 7$ (дясно). Синият пунктир обозначава мястото на вертикалния разрез.*

Най-интересният от гледна точка на това изследване случай на замърсяване наблюдаваме, когато бул. "Ал. Малинов" се оказва от подветрената страна на бл. 31, т.е. когато вятърът духа от северозапад (315°) (Фиг. 20).

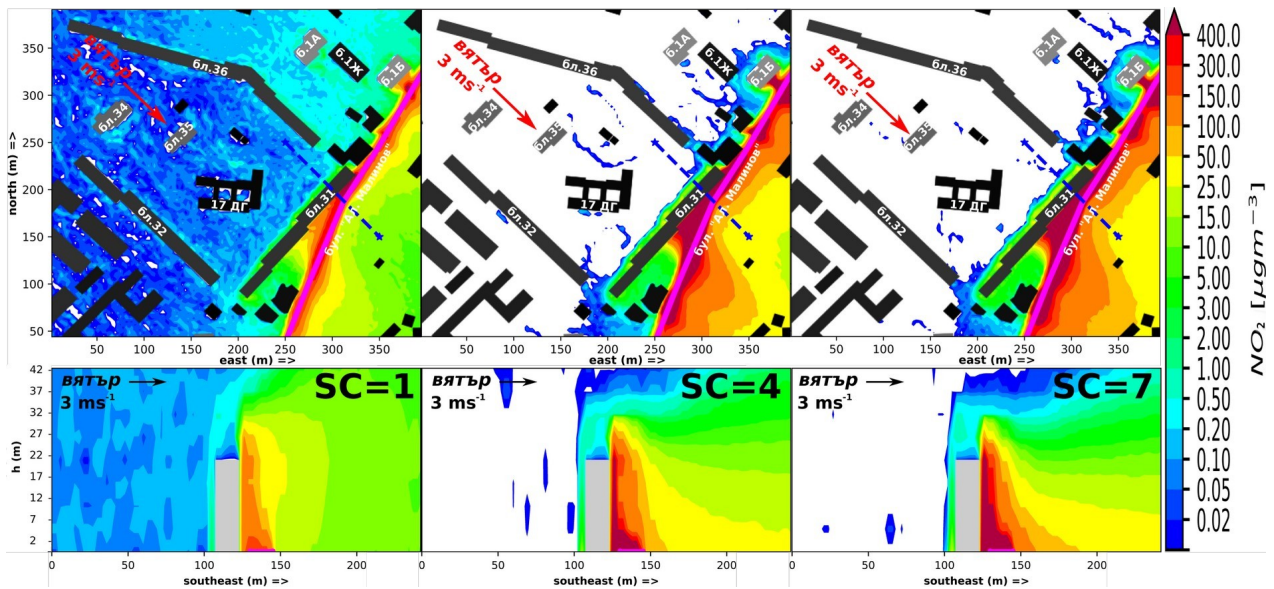
Въздушният поток минаващ покрай сградата се повлиява по такъв начин, че от подветрената ѝ страна се образува зона на рециркулация. Както се вижда на Фиг. 20, на мястото, където бул. "Ал. Малинов" се намира в непосредствена близост до бл. 31, замърсителят попада в тази зона и се натрупва; като резултат концентрациите му там значително се повишават.

Отново, както и в случая на безветрие, въздушните потоци при неустойчива стратификация осигуряват по-добро разпространение на NO_2 във вертикално направление, което намалява иначе високите концентрации при стената на блока, наблюдавани в случаите на неутрално и устойчиво стратифициран приземен слой. Както се вижда обаче, това става за сметка на повишаване на концентрациите на замърсителя от наветрената страна на сградата, в междублоковото пространство.

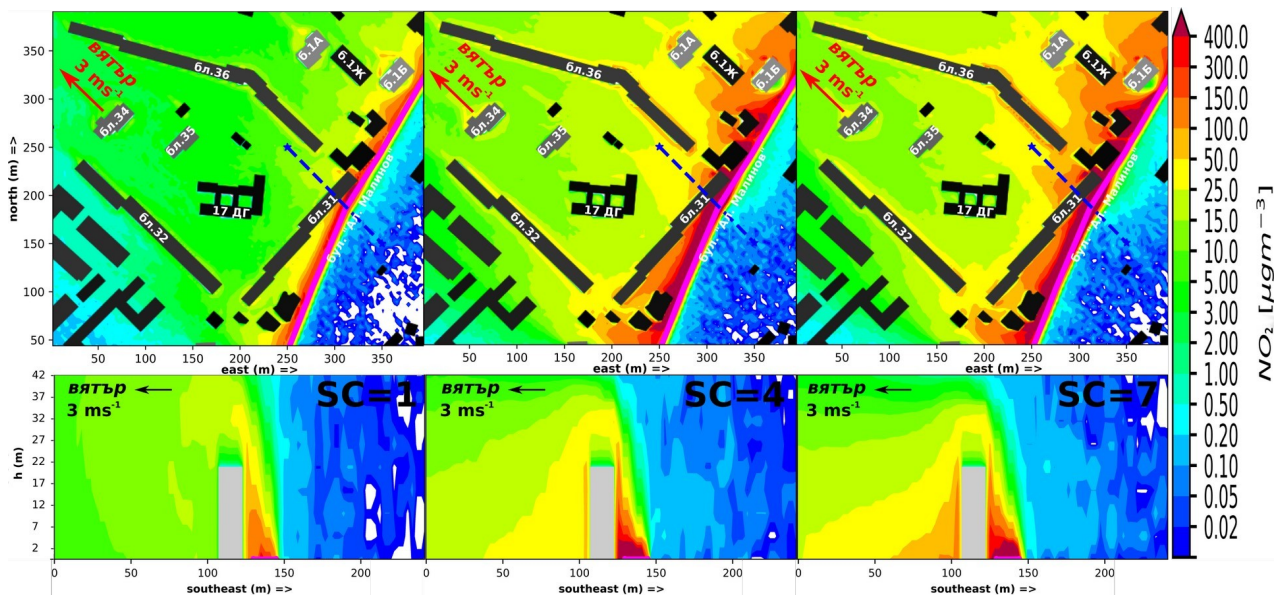
При вятър духащ от югоизточна посока (Фиг. 21), в случая с $SC = 1$ (силна неустойчивост), сравнително малка част от замърсителя попада в зоната на рециркулация от подветрената страна на блока, защото основното количество NO_2 се увелича от конвекцията и се отнася на по-голяма височина.

Когато е налице неутрална или устойчива стратификация се наблюдават високи концентрации, както при наветрената директно повлияна от струята замърсител стена, така и откъм подветрената страна. Това до голяма степен се дължи и на възникващите вертикални

вихри в подветрените вертикални ръбове на сградата, които увеличат замърсителя към подветрената страна.



Фиг. 20. Горизонтални полета на средночасови концентрации на NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) на височина 2 m (горе) и вертикални разрези (долу) при северозападен вятър със скорост 3 m s^{-1} , при класове на устойчивост $SC = 1$ (ляво), $SC = 4$ (средата) и $SC = 7$ (дясно).

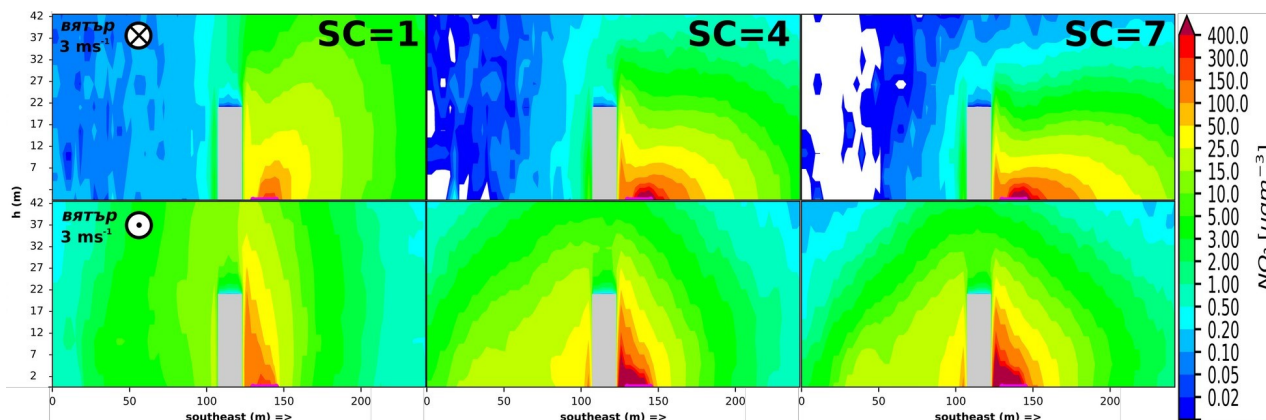


Фиг. 21. Горизонтални полета на средночасови концентрации на NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) на височина 2 m (горе) и вертикални разрези (долу) при югоизточен вятър със скорост 3 m s^{-1} , при класове на устойчивост $SC = 1$ (ляво), $SC = 4$ (средата) и $SC = 7$ (дясно).

В случаите, когато направлението на вятъра е успоредно на сградата (Фиг. 22), разпределението на концентрациите на замърсителите по стената откъм междублоковото пространство е повлияно главно от позицията на източника на замърсяване спрямо блока. Тъй като бул. "Ал. Малинов" сключва малък ъгъл с бл. 31, е налице асиметрия в това разпределение. При североизточен вятър (Фиг. 22, долен ред), NO_2 проникват до по-голяма степен в междублоковото пространство, отколкото при югозападен. Във втория случай се

получава нещо като "приплъзване" на въздушния поток по сградата. Като следствие NO_2 се отвежда на североизток – по булеварда.

Проведените тестови симулации за част от жилищен комплекс в София показват, че са възможни значителни натрупвания на замърсители в определени участъци, в зависимост от скоростта и посоката на несмутения поток, както и от условията на неустойчивост.



Фиг. 22. Вертикално разпределение на средночасови концентрации на NO_2 ($\mu\text{g m}^{-3}$) при югозападен (горе) и североизточен (долу) вятър със скорост 3 ms^{-1} , при класове на стабилност $SC = 1$ (ляво), $SC = 4$ (средата) и $SC = 7$ (дясно).

4. Обобщение и изводи

Проведените числени пресмятания с GRAL за полевия експеримент от района на Хамбург, Германия, реализиран в рамките на COST ES1006 демонстрират способността на модела да се справя като инструмент за ранно предупреждение, дори при ограничена като наличност входяща метеорологична информация.

Резултатите от проведените числени пресмятания за разпространение на замърсяване от трафика (NO_2) в част от ж.к. Младост -1, София, за идеализирани комбинации от метеорологични ситуации (скорост и посока на несмутения поток, различни условия на устойчивост) показват изключително нехомогенното поле на замърсителите, както в хоризонтално, така и във вертикално направление, както и обособяване на „горещи точки“ в които е възможно да има локално натрупване на замърсители.

Използването на модела за реални ситуации в части от даден град неминуемо изисква наличието на точни данни за разположението, вида и мощността на източниците, което не е предмет на тази работа.

V. Числени флуидодинамични (CFD) модели. Моделиране на дисперсията на замърсители в идеализиран уличен каньон с OpenFOAM

1. Понятие за числен флуидодинамичен модел (Computational Fluid Dynamics, CFD). Съвременни представители, техните възможности, производителност и приложения

CFD са модели, които пресмятат динамиката на средата (течна, газова, многокомпонентна), в която се разпространяват замърсителите и използват Ойлеровия подход да изчисляване на метеорологичните полета. Това съвсем не означава, че този подход е задължителен за прилагане и в частта от моделирането, отнасяща се до изчислението на дисперсията на замърсителите. Там е възможно да се прилага както Ойлеров, така и Лагранжев подход.

Всички CFD модели решават числено уравненията на Навие-Стокс, като в зависимост от приложените параметризации, числени схеми и подходи за затваряне, могат условно да се разделят на RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), LES (Large Eddy Simulation), нестационарни RANS (Unsteady RANS, URANS), хибридни RANS-LES и DES (Detached Eddy Simulation) и DNS (Direct Numeric Simulation) модели.

Идеята за CFD моделиране на разпространението на атмосферни замърсители датира отпреди около три десетилетия (Baklanov, 2000). CFD-RANS моделите са широко прилагани в промишлеността и академичните среди, главно заради значителните изчислителни ресурси, необходими за CFD-LES и DNS моделиране в големи по размери области (Lien and Yee, 2004). Стандартният $k - \epsilon$ модел е най-документируваният и утвърден RANS турбулентен модел за дисперсионни приложения в условия на град (Vardoulakis et al., 2011). Някои по-известни и утвърдени в практиката CFD програмни продукти, за които има оценки за изчислителна ефективност и които са валидирани с различни експериментални бази данни за дисперсия на замърсители са: PALM (Maronga et al., 2015), OpenFOAM (Rakai and Kristóf, 2013), Star CCM+ (Trini Castelli et al., 2015), VADIS (Franke et al., 2007), MISKAM (Balczo et al., 2011), Code Saturne (Waeytens et al., 2019), Ansys Fluent (Gergely et al., 2007), GRAL (Grawe et al., 2013).

В тази глава е обърнато по-специално внимание на CFD модела OpenFOAM.

2. Описание и кратка история на CFD модела OpenFOAM. Възможности и производителност

OpenFOAM (**O**pen **F**ield **O**peration **a**nd **M**anipulation) е CFD модел, който може да извършва симулации от всякакъв тип: RANS, URANS, LES, DES, DNS. Разработен е преди повече от 30 години като комерсиален продукт под името „FOAM“. След 2004г. вече е общодостъпен. Възможностите на модела са:

- Операции с тензори, векторни и скаларни полета;

- Дискретизации на частни диференциални уравнения използвайки опростен синтаксис;
- Решаване на линейни системи;
- Решаване на обикновени диференциални уравнения;
- Автоматични паралелизации на операции от високо ниво;
- Дефиниране на динамични изчислителни мрежи.

OpenFOAM е преди всичко C++ библиотека, която се използва за създаването на програмни приложения с конкретна насоченост. С достатъчно познаване на уравненията, описващи даден физичен процес и спазване на предписаните правила за програмиране, OpenFOAM дава възможност на потребителя, освен да използва наличните, да създаде и свои собствени изчислителни модули (англ. *solvers*). Моделът не е обвързан с конкретен алгоритъм на пресмятане. Той разполага с множество такива и изборът на която и да е от тях се оставя на потребителя.

3. Тестове и оценка на работата на CFD модела OpenFOAM за замърсяване в идеализиран уличен каньон

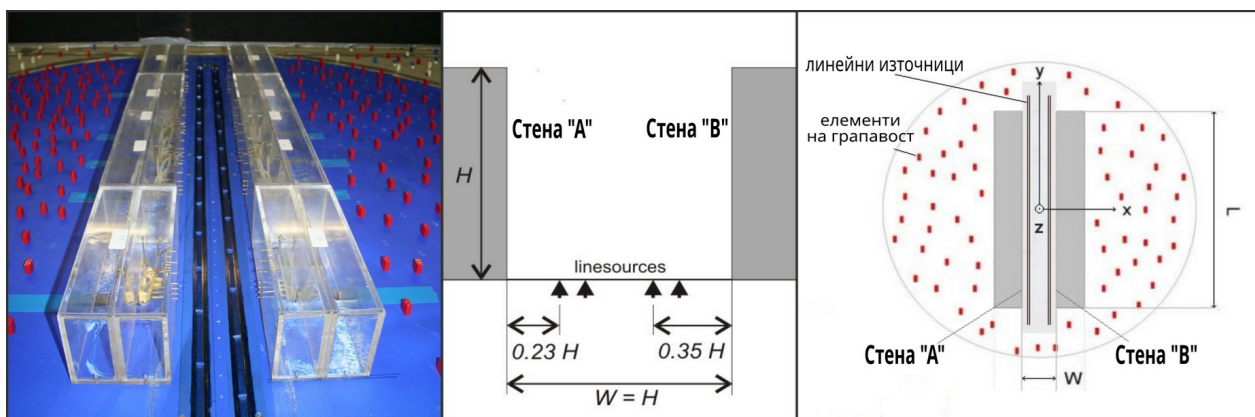
3.1. Описание на аеродинамичния тунел и използваната експериментална база данни

Цялата необходима информация за оценка на работата на модела е взета от CODASC (COncentration DAta of Street Canyons), аеродинамичен тунел № 4 (Gromke, 2013; CODASC, 2014), предоставена от Лабораторията по Аеродинамика на Сградите и Околната Среда към Института по Хидромеханика в Университета в Карлсруе, Германия. Това е база данни, която съдържа измервания на концентрациите на тестов замърсител в уличен каньон. В разглеждания случай, уличният каньон е симетричен по надлъжната си ос, с отношение ширина към височина $W/H = 1:1$ и мащаб 1:150 (Фиг. V.3.1). В пълен мащаб, две сгради с дължина 180 m и височина 18 m са разделени от 4-лентова двупосочна улица с ширина 18 m.

Входящият въздушен поток е модифициран с елементи на грапавост така, че да представя типичния профил на вятъра в АГС, при неутрална температурна стратификация. Референтната скорост на потока $U_{ref} = 4.7 \text{ ms}^{-1}$ е взета на височината на покривите на сградите (18 m в пълен мащаб), според практиката приложена от Jeanjean et al. (2015). Тестовият замърсител използван в този експеримент е серен хексафлуорид (SF_6), а концентрацията му се измерва на разстояние 5 mm (0.75 m в пълен мащаб) от стените на сградите. Серният хексафлуорид се изпуска от 2 чифта линейни източници с дължина 1200 mm (180 m в пълен мащаб, както е показано на Фиг. 23) разположени в средата на пътното платно. Общата мощност на източниците е 10 g s^{-1} . Измерената концентрация c_m се преобразува в нормализирана концентрация c^+ следвайки зависимостта:

$$c^+ = \frac{c_m H U_H}{Q/l} \quad (10)$$

където H е височината на сградите (m), U_H е скоростта на вятъра (ms^{-1}) на височина H , а Q/l е мощността на източника за единица разстояние ($\text{g m}^{-1} \text{s}^{-1}$).



Фиг. 23. Ляво: Модел на идеализиран уличен каньон без дървета; средата: Размери на уличния каньон; дясно: Схематично представяне на експеримента – изглед отгоре.

3.2. Подготовка и настройка на модела

3.2.1. Изчислителна мрежа. Начални и гранични условия. Параметризации

Представените тук CFD симулации са осъществени в RANS режим, на изчислителя `buoyantBoussinesqPimpleFoam` от `OpenFOAM v4.1`, който е модифициран чрез добавяне на уравнение за пренос и дифузия на пасивен скалар:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (UC) - \nabla^2 (DC) = Q \quad (11)$$

където C е пасивният скалар, който в дадения случай е концентрацията на замърсителя, U е скоростта на потока, Q е мощността на източника, а $D = D_m + D_t$ е коефициент, който включва в себе си молекулярната (D_m) и турбулентната дифузия (D_t) ($m^2 s^{-1}$). Стойността на D_m за въздух при зададената в този случай температура от $30^\circ C$ е $1.6276 \cdot 10^{-5} m^2 s^{-1}$, а $D_t = \nu_t / Sc_t$. Тук, $\nu_t = C_\mu k^2 / \epsilon$ е кинематичният турбулентен вискозитет ($m^2 s^{-1}$), Sc_t е безразмерното турбулентно число на Шмидт и $C_\mu = 0.09$ е емпирична константа. С модела са проведени тестове за различни стойности на Sc_t в диапазона от 0.2 до 0.7, през равни интервали от 0.1, за случая на вятър с посока перпендикулярна на уличния каньон (90°), при условия на безразлична температурна стратификация. Установено е, че стойност на $Sc_t = 0.4$ дава най-добро съвпадение между моделираните и реално измерените в тунела величини; тази стойност е приложена във всички останали разглеждани случаи.

Използваните параметри за моделираната област са изложени в Таблица 6.

Граничните условия са зададени, както е показано на Фиг. 24 и са съобразени с входящия в тунела въздушен поток. Границите на домейна, които се падат успоредни на направлението на вятъра са зададени като "symmetryPlane" (равнина на симетрия), горната граница – като "zeroGradient" (нулев градиент), отвеждащата потока равнина – като "freeStream" (буквално – "свободен поток"), а на земната повърхност и сградите е зададено "noSlip" (без приплъзване) гранично условие. Входящият поток е изчислен и зададен по начин отговарящ на профила на вятъра в аеродинамичния тунел, следвайки степенния закон:

$$u(z) = u_{ref}(z_{ref}) \left(\frac{z}{z_{ref}} \right)^\alpha \quad (12)$$

Тук, $u(z)$ е скоростта на вятъра на височина z , $u_{ref} = 4.7 \text{ ms}^{-1}$ е референтната скорост на вятъра на височина $z_{ref} = 0.12 \text{ m}$ (18 m в пълен мащаб), и $\alpha = 0.3$. Следвайки препоръките дадени от Richard и Нохей (1993), Blocken (2015), а също и основавайки се на експерименталните данни от тунела (Gromke et al., 2008), профилите на k и ε при входящата за потока граница на моделираната област са зададени като:

$$k(z) = \frac{u_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \left(1 - \frac{z}{\delta} \right) \quad (13)$$

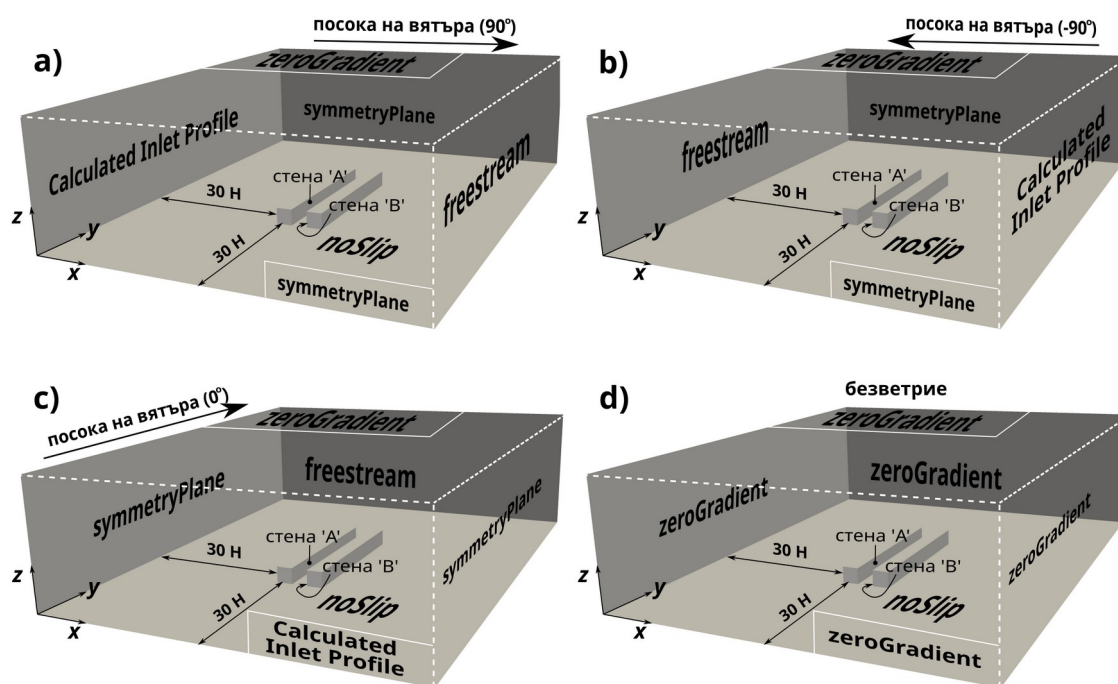
$$\varepsilon(z) = \frac{u_*^3}{\kappa z} \left(1 - \frac{z}{\delta} \right) \quad (14)$$

където u_* е динамичната скорост в АГС, $\kappa = 0.4$ е константата на von Kármán, z – координата по височината (m), а δ е дебелината на АГС (144 m в пълен и 0.96 m в реален мащаб). Параметърът на грапавост $z_0 = 0.0033 \text{ m}$ е зададен чрез използване на стенна гранична функция (англ. *wall function*), както при Gromke et al. (2008).

Таблица 6. CFD параметри за аеродинамичния тунел

Моделни параметри	Вид / мерна единица
Изчислителна мрежа	Шестостенна
Брой на клетките в мрежата	645120
Височина на уличния каньон (H)	120 mm
Широчина на уличния каньон (W)	120 mm
Дължина на уличния каньон (L)	1200 mm
Минимален размер на клетките по направление на оста x (Δx_{min})	0.055 H
Минимален размер на клетките по направление на оста y (Δy_{min})	0.165 H
Минимален размер на клетките по направление на оста z (Δz_{min})	0.055 H
Разстояние между уличния каньон и границите на моделираната област	30 H
Скорост на вятъра на височина H (U_{ref})	4.7 ms^{-1}
Динамична скорост (U_*)	0.52 ms^{-1}
Параметър на грапавост (z_0)	0.0033 m
Остагъчна сходимост	10^{-6}

Линейните източници в уличния каньон се представят като поредица от обемни източници, които са разположени на съответните определени от експерименталната постановка координати. Общата емисия на всички източници е 10 g s^{-1} .



Фиг. 24. Геометрия и гранични условия за въздушния поток използвани за симулацията на разпространението на замърсители в идеализан уличен каньон (отношение $W/H = 1$): а) при посока на вятъра = 90° ; б) при посока на вятъра = -90° ; в) при посока на вятъра = 0° ; д) при безветрие.

3.2.2. Моделиране на ефекти от неравномерно нагряване при уличен каньон

`BuoyantBoussinesqPimpleFoam` е изчислител за преходни процеси, на архимедово повлияни (англ. *buoyant*) турбулентни потоци от несвиваем флуид, където се използва приближението на Бусинеск:

$$\rho_k = 1 - \beta(T - T_{ref}) \quad (15)$$

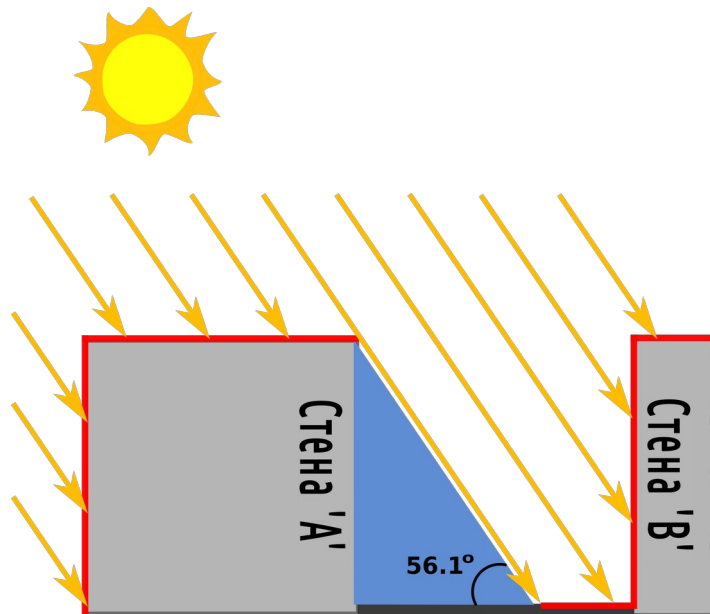
Тук ρ_k е ефективната (задвижваща) кинематична плътност, $\beta = 3.3106 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ е коефициент на топлинно разширение при 303 K (30°C), T е температурата на разглеждания флуиден обем (K), а T_{ref} е температурата на окръжаващата го флуидна среда (K).

Температурата на въздуха над огрятата от слънцето част от уличния каньон, се представя чрез задаване на средната температура на лежащия над тях еднометров слой. Дебелината на този слой е съобразена с разрешението на мрежата в x - z равнината, във вътрешността на каньона (в пълен мащаб), което отговаря на Δz_{min} в реален мащаб. Зависимостта на температурата T от разстоянието h до нагрятите повърхности се задава с получената по емпиричен път формула (Duncan, 2011):

$$T(h) = -1.4 \ln(h) + 1.033 T_{ref} \quad (16)$$

където $T(h)$ е температурата (в °C, K) на височина h (m), а T_{ref} е температурата (в °C, K) измерена на височина $h = 2.0$ m. Средната температура се изчислява с помощта на теоремата за средна стойност:

$$T_{mean} = \frac{1}{h-h_0} \int_{h_0}^h T(h) dh, \quad h > 0 \quad (17)$$



Фиг. 25. Нагreti от слънцето участъци от уличния каньон.

За да се изследва влиянието на неравномерното нагряване на идеализирания уличен каньон, описан по-горе, е приложен температурен режим характерен за летен ден в гр. София. За целта на проведеното изследване, е взета измерената на 29.07.2017 в 14:00 часа местно време в НИМХ – гр. София ($\approx 43^\circ\text{N}$) температура $T_{ref} = 30^\circ\text{C}$ (303 K), което дава средна температура от 32.4°C (305.4 K) в еднометровия въздушен слой над нагрялата повърхност. На тази дата и в този час, слънцето се издига на 56.1° над хоризонта. Ориентацията на уличния каньон е зададена така, че се нагряват само стените лежащи в $u-z$ равнината. При такава конфигурация, стена «А» попада в собствената си сянка, както и част от улицата, с широчина 0.67 Н. Стена «В», покривите на сградите и останалите 0.33 Н от улицата са изложени на слънце (Фиг. 25).

С цел опростяване на задачата за нагряването, са зададени идентични температурни профили за еднометровия въздушен слой лежащ над огрятите от слънцето стени и покриви на сградите, и пътната настилка. Тук трябва изрично да се упомене, че това гранично условие за температурата не е приложено за повърхностите извън уличния каньон.

3.3. Резултати и коментари

3.3.1. Сравнителен анализ на резултатите от CFD модела и измерените в аеродинамичния тунел данни

За да бъде оценена работата на модела в условията на неутрална стратификация, е направено сравнение между резултатите от OpenFOAM и измерванията в тунела – за случаите, когато направлението на вятъра е перпендикулярно (90°) и успоредно (0°) на оста улицата. Не се отчита неравномерно нагряване.

Таблица 7 показва стойностите на FB, NMSE, FAC2 и R, отговарящи на различните приложени стойности на турбулентното число на Шмидт Sc_t , за случаите с направление на вятъра 90°, и при $Sc_t = 0.4$ – за случая с посока 0° – без нагряване на земната повърхност. Стойностите на статистическите показатели лежащи извън допустимите граници са обозначени с червено, а тези с най-добро съвпадение – със зелено.

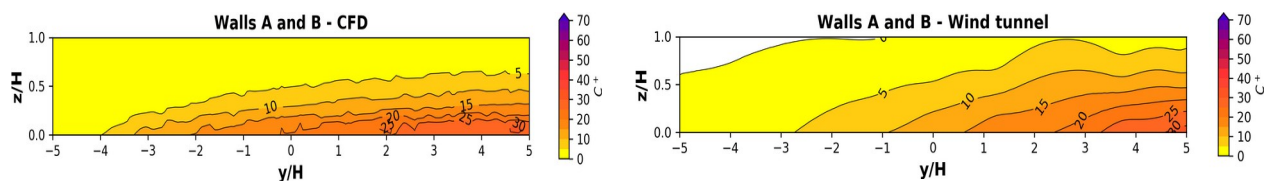
Таблица 7. Стойности на приложените статистически показатели за двойките моделирани (OpenFOAM) – измерени (аеродинамичен тунел) концентрации, при различни стойности на турбулентното число на Шмидт (Sc_t), за случая с посока на вятъра 90° и при $Sc_t = 0.4$ – за случая с посока на вятъра 0°, без нагряване. В зелено са дадени най-добрите стойности на показателя за конкретния случай, а в червено – тези, които не удовлетворяват критериите на Chang and Hanna (2005).

Посока на вятъра 90°							Посока на вятъра 0°
Стена 'A'							
Sc_t	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.4
FB	0.43	0.24	0.12	0.03	-0.04	-0.09	0.00
NMSE	0.24	0.12	0.10	0.13	0.17	0.22	0.21
FAC2	0.72	0.90	0.96	0.97	0.99	1.00	0.71
R	0.94	0.93	0.92	0.91	0.90	0.90	0.91
Стена 'B'							
FB	0.39	0.22	0.06	-0.08	-0.20	-0.3	0.00
NMSE	0.29	0.09	0.04	0.09	0.19	0.33	0.21
FAC2	0.93	1.00	1.00	1.00	1.00	0.96	0.71
R	0.94	0.97	0.96	0.95	0.95	0.94	0.91

Вземайки предвид дадените в таблицата статистическите показатели, моделираните концентрации на SF₆ при $Sc_t = 0.4$ показват най-добро съвпадение с измерените. Поради тази причина 0.4 е и стойността на турбулентното число на Шмидт, която е използвана за всички останали сценарии, включително и тези с нагряване.

В случая с посока на вятъра успоредна на уличния каньон (Фиг. 26), полето на изчислените концентрации е добре представено от модела, сравнено с действително измерените концентрации. Статистическата оценка показва висока корелация $R = 0.91$, $FB = 0.0$ и $NMSE$ в допустимите граници (Таблица 7). Стойността на FAC2 (0.71) също удовлетворява критериите, но резултатът тук е значително по-неточен от този в случая с направление на вятъра 90°. Причината за това се крие в спецификите на използвания от

модела алгоритъм, който дава по-слабо изразено смесване във вертикална посока, сравнено с наблюдаваното в тунела.

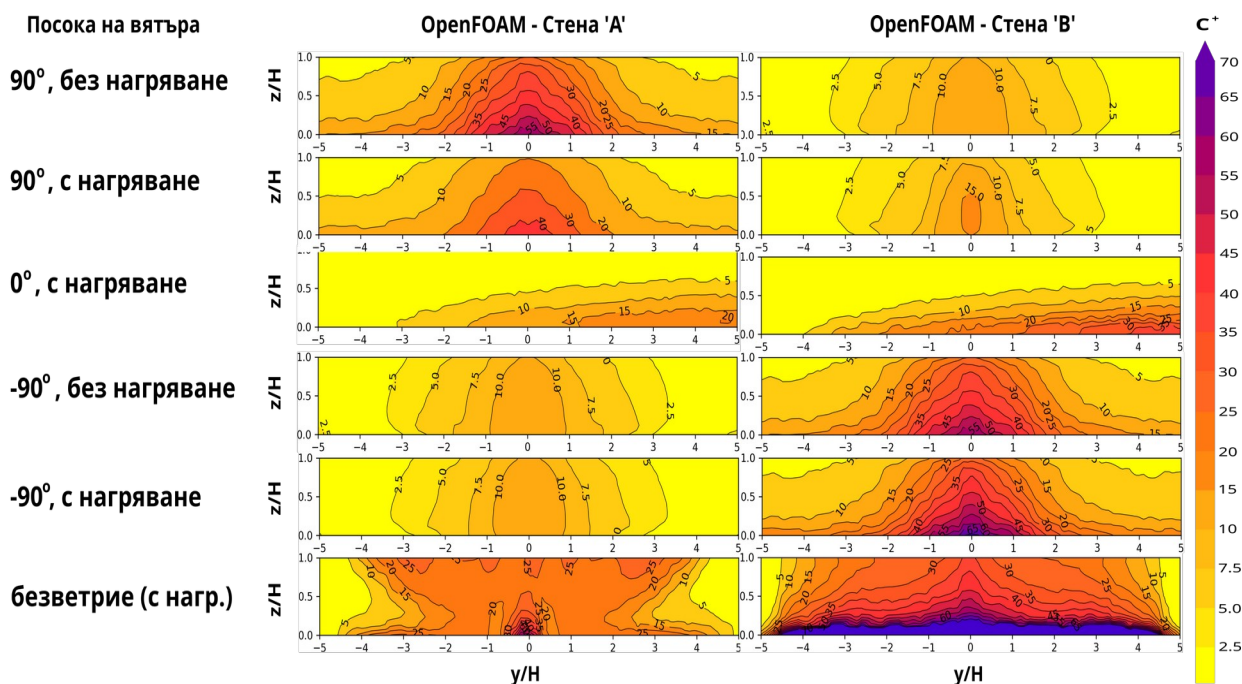


Фиг. 26. Моделирани от OpenFOAM (ляво) и измерени в аеродинамичния тунел (дясно) полета на концентрациите на SF₆, посока на вятъра 0°, Sc_t = 0.4.

3.3.2. Сравнение между моделираните данни с и без отчитане на неравномерно нагряване

Направени са моделни тестове с посоки на вятъра -90°, 0°, 90° и в условия на безветрие, за да се провери, как OpenFOAM представя въздействието на неравномерното нагряване на твърдите повърхности (пътната настилка и стените на сградите) върху компонентите на скоростта на въздушните потоци.

На Фиг. 27 може да се види как концентрациите на SF₆ при стените на уличния каньон се променят под влияние неравномерното нагряване.

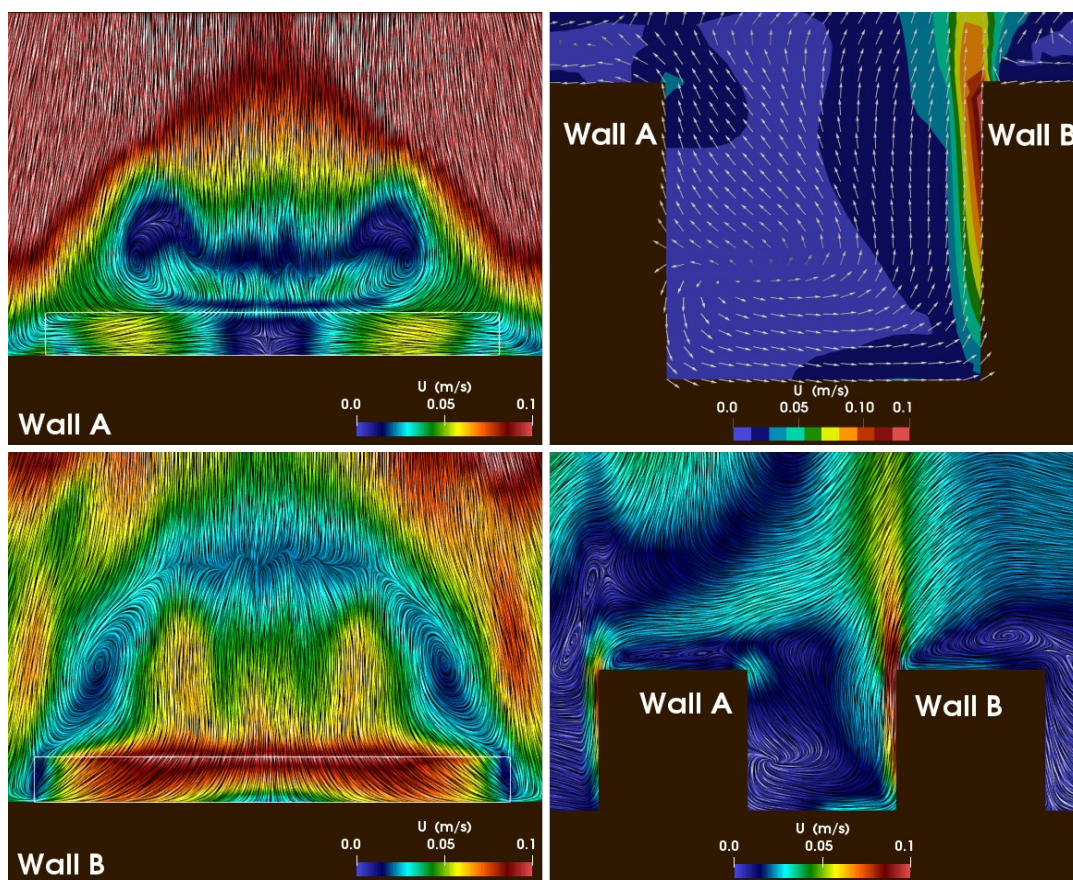


Фиг. 27. Моделирани полета на концентрацията при стените на уличния каньон, за случаите с посока на вятъра -90°, 0°, 90° и при безветрие, в присъствието на нагряване (забележка: изображенията показващи случаите без нагряване при посоки на вятъра -90° и 90° са добавени за по-добро визуално сравнение).

При липсата на какъвто и да било вятър, освен дифузията, само въздушният поток генериран от нагряването участва в пренасянето на замърсителя. В този случай, в каньона се появява квази-рециркулация, която отнася трасера към нагрявата стена «В». Като резултат,

моделираните концентрации на SF_6 там се повишават значително. Тук трябва да се отбележи, че полето на термично генерирания вятър е в такъв вид, защото температурните гранични условия са зададени само в областта на уличния каньон. Ако тези условия бяха приложени върху цялата област на моделиране, тогава конфигурацията на потока щеше да има коренно различен вид.

Както се вижда на *Фиг. 28*, генерираните въздушни потоци, породени от неравномерното нагряване в уличния каньон, са много слаби. Независимо от това, взаимодействието между тези потоци и външния вятър не бива да се пренебрегва. В почти всички случаи, един отделно разглеждан уличен каньон е малка част от много по-голямата и сложно устроена система от градски неравности. При определени метеорологични условия е възможно да се наблюдават най-различни ефекти, като например – усилване на конвективните процеси в по-голям мащаб.



Фиг. 28. *Топлинно генерирани потоци при стени 'A' и 'B' (горе и долу, ляво) и конфигурация на квази-рециркулацията в средната част на каньона, при условия на безветрие (горе и долу, дясно).*

В случаите с безветрие и при неравномерно нагряване, в уличния каньон се наблюдава добре развита квази-рециркулация. В този случай, обаче, не е взето предвид влиянието на въздушните потоци, които се образуват под действието на преминаващите пътни превозни средства. В зависимост от скоростта на движение на МПС и натовареността на трафика като цяло, може да се наблюдава цял спектър от комбинации на потока, като в единия край спектъра, конвективно генерираният поток на практика не се влияе от движението на превозните средства, а в другия – той се разрушава напълно.

4. Сравнение на резултати от OpenFOAM и други модели

В тази секция е изложено сравнение между изпълненията на Гаусовия модел AERMOD, Лагранжевия модел GRAL (в CFD режим) и осъществим (realizable) $k - \epsilon$ CFD-RANS (с използван SIMPLE алгоритъм) модел от OpenFOAM библиотеката. Използвана базата данни от експеримента “Michelstadt”, в аеродинамичен тунел, от COST Акция ES1006. В Таблица V.5 са представени входящите данни необходими за трите модела, както и информация за изчислителните мрежи, където е приложима.

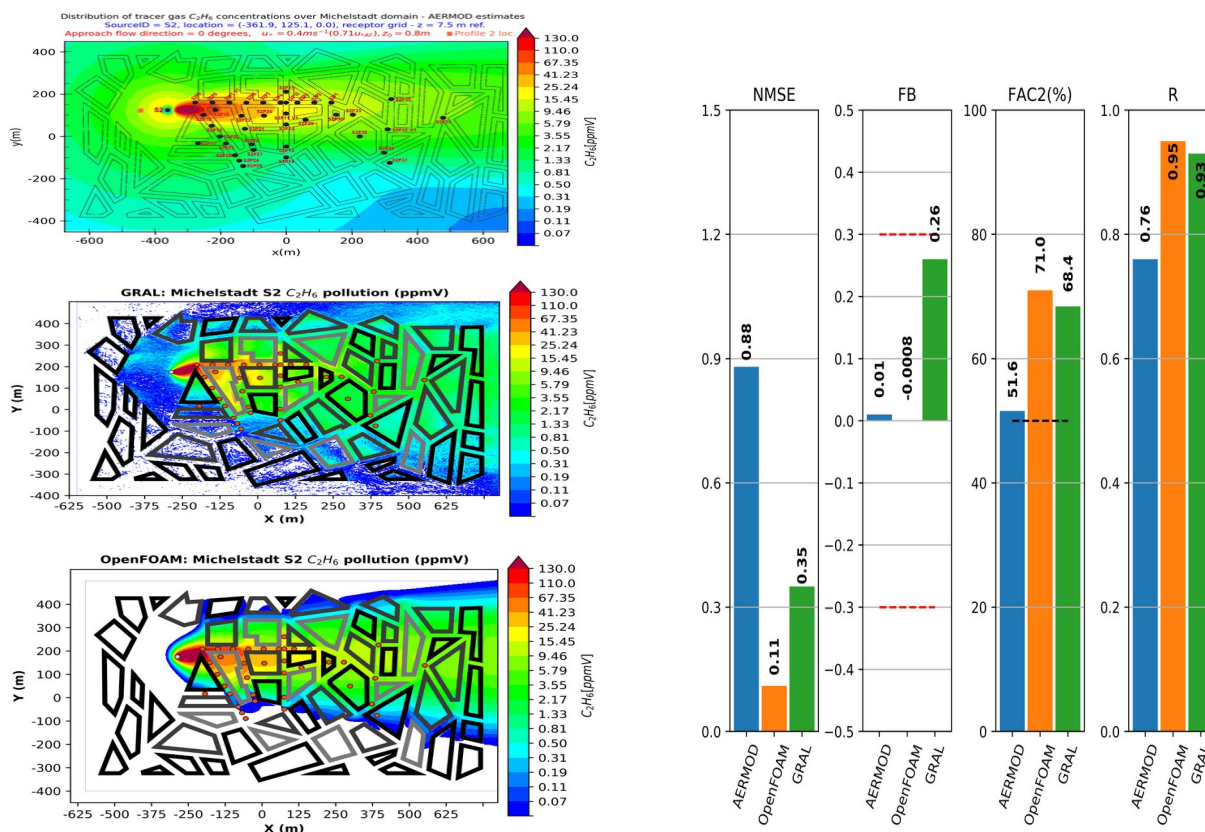
Таблица 8. Основна информация за изследваните модели: тип модел, необходима входяща информация и изчислително време. Входящите данни са съобразени с експеримента “Michelstadt”.

	AERMOD	OpenFOAM	GRAL
Тип модел	Гаусов	CFD-RANS ($k - \epsilon$), Ойлеров	CFD Ойлеров + Лагранжев частичков
“Michelstadt” домейн (X, Y, Z)	1450 x 900 m (хоризонтална равнина). В Z няма ограничение.	1550 x 1000 x 100 m	1550 x 1000 x 100 m
Изчислителна мрежа	неприложима	Кубична, прилепваща към стените на сградите. (SnappyHexMesh), $3,5 \cdot 10^6$ клетки	Кубична, $4 \cdot 10^6$ клетки
Температура на въздуха, T	20°C	293.15°K (20°C)	20°C
Вятър – скорост U, посока d, височина на измерване H)	$U = 6 \text{ ms}^{-1}$, $d = 0^\circ$, $H = 99.9 \text{ m}$. Вертикалният профил е взет от базата данни.	$U = 6 \text{ ms}^{-1}$, $d = 0^\circ$, $H = 99.9 \text{ m}$. Вертикалният профил е взет от базата данни и е зададен като гранично условие.	$U = 6 \text{ ms}^{-1}$, $d = 0^\circ$, $H = 99.9 \text{ m}$. Вертикалният профил се изчислява от модела.
Атмосферно налягане, p	101350Pa	101350Pa	101350Pa
Динамична скорост, u_*	0.4 ms^{-1} (постоянна за целия домейн)	0.4 ms^{-1} (за входящия поток – гранично условие)	Изчислява се от модела
Атмосферна стратификация (температурна)	Неутрална. Използва теорията на подобие на Монин-Обухов.	Неутрална. Използва приближението на Бусинеск.	Неутрална. (Pasquill-Gifford клас D)
Параметър на грапавост (z_0)	0.8 m	Пясъчната грапавост $k_s = z_0 = 0.8 \text{ m}$ (Gromke et al., 2008)	$z_0 = 0.8 \text{ m}$ Грапавост на стените на сградите $z_b = 0.01 \text{ m}$
Време за изчисление (преносим компютър HP ProBook 450-G2, 16GB RAM, CPU Intel i7, 2 ядра)	7 s	432000 s (120 h, 5 денонощия)	4200 s (3400 s за CFD симулация на потоците и 800s за Лагранжевия модул)

На Фиг. 29. (лявата колона) са показани полетата на замърсяване така, както са представени съответно от AERMOD, GRAL и OpenFOAM. Изображенията демонстрират някои характерните за всеки модел черти – AERMOD не отчита влиянието на сградите върху

въздушния поток и се вижда, че струята е несмутена от тях; при GRAL се вижда зърнестата структура на полето на замърсяване, дължаща се на представянето му посредством Лагранжеви частички; OpenFOAM и GRAL отчитат сградите и представените от тях полета на замърсяване имат по-сложна конфигурация.

На Фиг. 29 (дясно). са дадени сравненията между трите модела, по прилаганите в рамката на COST Акция ES1006 статистически показатели – NMSE, FB, FAC2 и R. Резултатите посочват OpenFOAM като най-точен модел, но има допълнителни критерии, които трябва да се вземат предвид, когато се прави сравнение между модели. Обикновено, тези критерии се съобразяват с предназначението на оценявания модел – дали ще се използва за регулаторни, изследователски, или други цели. В повечето случаи се търси компромис между точност и скорост на изпълнение. В посоченото изследване, моделирането е осъществено на преносим компютър с двудрен процесор и 16GB RAM. Докато физическото време за симулация с AERMOD в този случай отнема едва 7s, а с GRAL – 3400s (около 1 час), то достигането на стационарно решение с OpenFOAM отнема 5 денонощия (120 часа).



Фиг. 29. Ляво: Полета на замърсяване с пасивен трасер – етан (C_2H_6), представени от: Гаусовия дисперсионен модел AERMOD (горе); CFD-Лагранжевия модел GRAL (средата); OpenFOAM, realizable k - ϵ CFD-RANS, SIMPLE алгоритъм (долу). Дясно: Сравнение на статистическите показатели NMSE, FB, FAC2 и R за AERMOD, OpenFOAM и GRAL

Показаните тук резултати са най-добрата извадка от проведените серии тестове за чувствителност към входящите параметри. За AERMOD това са динамичната скорост $u_* = 0.4 \text{ ms}^{-1}$ и параметърът на граваост $z_0 = 0.8 \text{ m}$ (резултатите от AERMOD са представени в

Глава III), за GRAL – параметърът на грапавост $z_o = 0.8 \text{ m}$ и за OpenFOAM – турбулентното число на Шмит $Sc_t = 0.4$.

5. Обобщение и изводи

Направените изследвания и анализи указват, че CFD моделът OpenFOAM може да даде много детайли, както за разпределението на потока с отчитане на сгради, така и за разпространеното на замърсителите. Той указва също, че нагряването на сградите съществено може да промени компонентите на скоростта на вятъра, а от там и местоположението на зоните с натрупване на замърсители. Все още, обаче, този вид модели имат по-голяма стойност за изследователски задачи. При дисперсионно моделиране в регулаторен аспект, когато са необходими пресмятания за поне една календарна година, с отчитане на различен тип атмосферни условия и замърсители, моделите от Гаусов и Лагранжев тип имат предимство.

VI. Заключение

Направени са тестове и сравнения на резултатите от 5 модела – различни по сложност и първоначално предназначение – с данни от измервания в пълномащабни полеви измервания и в аеродинамични тунели. С четири от тях – ALOHA, TRACE, AERMOD и GRAL, са направени тестове за приложимост като инструменти за ранно предупреждение при аварийни ситуации на замърсяване в урбанизирана среда.

Разглежданите Глава III Гаусови дисперсионни модели – ALOHA, TRACE и AERMOD използват вариращи по сложност алгоритми и параметризации на АГС. В това отношение, като регулаторен полу-емпиричен модел, AERMOD се представя най-добре и, както е споменато на същото място – при подходящи предварителни настройки и осигурен работен интерфейс, той може да бъде използван и като инструмент за ранно предупреждение при ситуации на аварийни изпускания на замърсители. Недостатъци на модела са сравнително трудното му усвояване от потребителя и необходимостта от захранване с по-подробна метеорологична информация. ALOHA и TRACE от друга страна, са разработени с идеята, че с тях трябва да се работи бързо и експедитивно. Затова изискванията им към входни данни са ограничени до минимум. Това, разбира се, става с цената на по-ненадеждни резултати, когато става въпрос за изчисляване на полетата на концентрация на замърсители в среда с високо строителство. И двата модела по никакъв начин не отчитат влиянието на сградите върху преминаващия въздушен поток и това може да ги направи неприложими в гъсто застроени райони с високи сгради, особено ако източникът е разположен в близост до земната повърхност.

В Глава V е направена оценка на работата на buoyantBoussinesqPimpleFoam изчислителя от CFD модела OpenFOAM в идеализиран уличен каньон. За целта е използвана база данни от измервания в аеродинамичен тунел (Gromke, 2013; CODASC, 2014), като – за разлика от повечето други физически експерименти, в CODASC източниците на замърсяване са

линейни. Изчислителният модул `buoyantBoussinesqPimpleFoam` е допълнително модифициран с добавяне уравнение за транспорт на пасивен скалар.

При моделирането с OpenFOAM е използван нестандартен подход за представяне на нагряването на въздуха при земята, а именно – посредством задаване на емпирично изведената средна температура в непосредствено лежащите над земната повърхност клетки от изчислителната мрежа. Предимство на този подход е, че нагряването се задава директно като гранично условие и така отпада нуждата прилагане на радиационни схеми, които консумират изчислителен ресурс. Основни недостатъци са необходимостта от определяне на профили на температурата за всеки вид повърхност и пренебрегването на многократните отражения при радиационен обмен.

В същата глава е направено и сравнение между измерените в експеримента “Michelstadt” стойности на концентрацията на етан (C_2H_6) и тези моделирани от AERMOD, GRAL и OpenFOAM. Времето за изчисления, за всеки от моделите, е съответно 7 s, 3400 s (по-малко от 1 час) и 4,32.105 s (5 денонощия). Това означава, че при моделирането на такъв сценарий, GRAL е около 500 пъти по-бавен от AERMOD и 120 пъти по-бърз от OpenFOAM. Статистически, най-добре се представя OpenFOAM с $NMSE = 0.14$, $FB \approx 0.0$, $FAC2 = 0.71$ и $R = 0.95$, следван от GRAL с $NMSE = 0.35$, $FB = 0.26$, $FAC2 = 0.68$ и $R = 0.93$. AERMOD е с $NMSE = 0.88$, $FB = 0.01$, $FAC2 = 0.52$ и $R = 0.76$. Стойността на FB за GRAL е по-голяма от тази на AERMOD, което означава, че в дадения случай, спрямо измерените стойности, Лагранжевият модел има по-занижени очаквания от Гаусовия. По отношение на баланса между точност и необходим изчислителен ресурс GRAL се оказва в “златната среда” – това е модел, който отчита влиянието на сградите върху въздушния поток и отнема малко повече от час на симулация. Освен това, за разлика от AERMOD, GRAL поддържа паралелни изчисления, което може значително да намали времето за симулация. Поради тези причини GRAL се явява и най-подходящ за практическо моделиране на замърсяването в градска среда, още повече че разполага с удобна за работа мултиплатформена (съвместима с Windows и Linux) графична среда.

VII. Научни приноси, публикации и представяне на резултатите по дисертацията

1. Приноси на дисертационния труд

- 1) Проведено е комплексно проучване и критичен анализ на използвани понастоящем числени модели за дисперсията на замърсители в градска среда (по теоретична основа, цел на приложимост, компютърни ресурси, входна информация)
- 2) Усвоени са два съвременни дисперсионни модела, способни да описват явно (а не чрез параметризации) влиянието на сгради и други препятствия върху разпределението на замърсителите с висока разделителна способност в изследвания район: Лагранжевия модел със CFD модул GRAL и CFD модела OpenFOAM. Прилагането на GRAL за

симулации с висока разделително способност за част от София е първо по рода си използване на подобни модели в страната.

- 3) Приложен е нов подход в CFD моделирането над нагрети повърхности – без изчисляване на радиационния обмен, чрез емпирично задаване на температурата на непосредствено лежащия над нагрятата повърхност слой .
- 4) Направен е сравнителен анализ на резултати от GRAL и OpenFOAM с такива от по-прости Гаусови модели чрез валидиране с данни от пълномащабни полеви измервания и от аеродинамични тунели. Посочени са съответните предимства и недостатъци на всички разглеждани модели и условията за тяхното практическо приложение.

2. Публикации по дисертацията

- 1) **Petrov, A.** (2019). Evaluation of OpenFOAM against CODASC wind tunnel database and impact of heating on the flow in an idealized street canyon, *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. **65**, Nos. 1-3, pp.149–163. <https://doi.org/10.1504/IJEP.2019.101838> (Quartile Q3)
- 2) **Petrov A.**, et al. (2019). An Urban Air Pollution Modelling Test: GRAL vs. CUTE Case 1, *AIP Conf. Proc.* 2075, 120007, pp. 12007-1-120007-6, <https://doi.org/10.1063/1.5091265> (SJR 0.104)
- 3) Trini Castelli, S., Baumann-Stanzer, K., Leitzl, B., Berbekar, E., Rakai, A., Fuka, V., Hellsten, A., Milliez, M., **Petrov, A.**, Efthimiou, G., Andronopoulos, S., Tinarelli, G., Tavares, R., Armand, P., Gariazzo, C., Jurcakova, K., Gašparac, G., Nibart, M., (2016). *Evaluation of local-scale models for accidental releases in built environments – results of the modelling exercises in COST Action ES1006*. Air Pollution Modeling and its Application XXIV, D. Steyn and N. Chaumerliac (eds.) Springer Proceedings in Complexity, Springer International Publishing Switzerland, https://doi.org/10.1007/978-3-319-24478-5_79 (SJR 0.132)
- 4) **Petrov A.**, Valente J., Bauman-Stantzer K., Batchvarova E. (2015). *Applicability of Gaussian dispersion models for accidental releases in urban environment – results of the “Michelstadt” test case in COST Action ES1006*, HARMO 2014 - 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Proceedings, pp. 730–735
Available at: https://harmo.org/Conferences/Proceedings/_Varna/publishedSections/H16-185-Petrov-EA.pdf (SJR 0.104)
- 5) **А. Петров**, Е. Бъчварова, М. Коларова (2016). *Оценка на работата на гаусовия дисперсионен модел AERMOD като средство за ранно предупреждение при замърсяване на въздуха в градска среда*, III Национален Конгрес по Физически Науки, 29.09 - 02.10.2016г. CD, Херон Прес-София, 2016, ISBN:978-954-580-364-2

3. Участия в проекти

3.1. Ръководителство на научни проекти, финансирани от български източници

- 1) Проект “Моделиране на атмосферното замърсяване в градска среда” (2017 – 2019), ръководител: **Антон Петров**, консултант: доц. д-р Е. Георгиева, Програма за подпомагане на млади учени и докторанти в БАН – 2017 г, договор №ДФПН-17-170/03.08.2017.
- 2) Проект “Изграждане на система за прогнозиране на замърсяването на въздуха в локален мащаб” финансиран от Министерството на образованието и науката (МОН) по "Национална програма за подпомагане на млади учени и постдокторанти". Дог. ПО-12-1-4/01.03.2019. Период: 04.03.2019 – 0309.2019г. Ръководител: **Антон Петров**, научен консултант: проф. д-р Д. Атанасов.
- 3) Проект “Захранване на дисперсионен модел с данни от прогностичен модел. Автоматизация на процеса и въвеждане в оперативен режим”, финансиран по Национална програма „Млади учени и постдокторанти“ на Министерството на образованието и науката (МОН). Дог. ЧР-04-20 /12.05.2020 г. Период: 15.05.2020 г. – 14.11.2020 г. Ръководител: **Антон Петров**. Научен консултант: проф. д-р Димитър Атанасов.

3.2. Участие в научни проекти, финансирани от чуждестранни източници

- 1) COST Action ES1006: Evaluation, improvement and guidance for the use of local-scale emergency prediction and response tools for airborne hazards in built environments – 2012-2015 – Валидация на Гаусовите дисперсионни модели AERMOD, ALOHA и TRACE; Заключителна статистическа обработка на данните от експеримент CUTE (Complex Urban Terrain Experiment), с помощта на създадения в рамката на проекта постпроцесор за статистически анализ. Ръководител: проф. Bernd Leitl (bernd.leitl@uni-hamburg.de)
- 2) Проект „INNOAIR“ (Innovative demand responsive green public transportation for cleaner air in urban environment – INNOAIR), финансиран от Европейски фонд за регионално развитие, договор № UIA05-202, по инициативата "Иновативни дейности за градско развитие" (Urban Innovative Actions) на ЕС (01.07.2020 – 01.07.2023 г.). Ръководител: доц. д-р Т. Спасова.

Участия в семинари и доклади асоциирани с проекта:

- Онлайн семинар „Моделиране на атмосферното замърсяване“ – проведен на 24.09.2021г. Изнесена е презентация на тема: „Авангардни модели с отчитане на характеристики на градската среда“.
(https://innoair-sofia.eu/images/documents/APetrov_Complex_Models.pdf).
- Доклад/проучване: „Моделиране на данни за трафика и замърсяването на въздуха“. Автори: Н. Нейков, **А. Петров**, Н. Нейкова, Д. Атанасов, В. Манева-Петрова, Х. Кирилова-Гълъбова, Л. Бочева, Е. Христова, Р. Нейкова, В. Николов, М. Коларова, Б. Ценова.

4. Представяне на резултатите от дисертацията

4.1. Представяне на резултатите на научни форуми

4.1.1. Доклад пред научно мероприятие в страната

- **Антон Петров:** „Оценка на работата на Гаусовия дисперсионен модел AERMOD като средство за ранно предупреждение при замърсяване на въздуха в градска среда“ (**презентация**) Трети Национален конгрес по физически науки, София, 23.09. - 02.10.2016г.;
- **Антон Петров:** „Влияние на неравномерното нагряване върху въздушния поток и разпределението на замърсителите в идеализиран уличен каньон” (**презентация**), XXVIII Международна Научна Конференция, „Българското европредседателство – иновации и просперитет“, гр. Стара Загора, 31 май - 1 юни 2018;
- **A. Petrov, E. Georgieva:** "An Urban Air Pollution Modelling Test: GRAL vs. CUTE Case 1." (**постер**), 10th Jubilee Conference of the Balkan Physical Union (BPU10), 08.2018.

4.1.2. Доклад пред научно мероприятие в чужбина

- **A. Petrov:** “Evaluation of OpenFOAM against CODASC wind tunnel data base and impact of heating on the flow in an idealized street canyon” (**постер**) – XVIII Международна Конференция по Хармонизация в Рамката на Моделиране Атмосферното Замърсяване за Регулаторни Цели (18th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes – HARMO 18), 09-12.10.2017, Болоня, Италия.

5. Награди

- II награда за най-добър постер: “Evaluation of OpenFOAM against CODASC wind tunnel data base and impact of heating on the flow in an idealized street canyon” – XVIII Международна Конференция по Хармонизация в Рамката на Моделиране Атмосферното Замърсяване за Регулаторни Цели (18th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes – HARMO 18), 09-12.10.2017, Болоня, Италия.

БИБЛИОГРАФИЯ

- AERMOD (2022). *User's Guide for the AMS/EPA Regulatory Model (AERMOD)*, EPA-454/B-22-007, Office of Air Quality Planning and Standards Air Quality Assessment Division Research Triangle Park, NC, June 2022
- ASHRAE (2007). *Building Air Intake and Exhaust Design*. ASHRAE Handbook - Heating, Ventilating, and Air-conditioning Applications (Chapter 44). American Society of Heating, Refrigerating and Air-conditioning Engineers, Atlanta, United States
- Atanassov, D., (2003). *Validation of the Eulerian Pollution Transport Model PolTran on the Kincaid Data Set*, Int. J. Environment & Pollution, 20, No.1-6, 105-113.
- Aubrun, S., Leiti, B. (2004). *Unsteady characteristics of the dispersion process in the vicinity of a pig barn. Wind tunnel experiments and comparison with field data*. Atmos. Environ. 38, 81-93.
- Balczó, M., Balogh, M., Goricsán, I., Nagel, T., Suda, J. M., and Lajos, T. (2011). *Air quality around motorway tunnels in complex terrain – computational fluid dynamics modeling and comparison to wind tunnel data*, Quarterly Journal of the Hungarian Meteorological Service, Vol. 115, No. 3, July–September 2011, pp. 179–204.
- Blocken, B. (2015). *Computational Fluid Dynamics for Urban Physics: Importance, scales, possibilities, limitations and ten tips and tricks towards accurate and reliable simulations* [online], Build. Environ. 91, pp. 219-245. http://www.urbanphysics.net/2015_BAE_Blocken_Review_CFD_for_UP_Preprint.pdf (accessed September, 23th 2018)
- CODASC (2014). *Concentration Data of Street Canyon*. <https://www.umweltaerodynamik.de/bilder-originale/CODA/CODASC.html>
- COST ES 1006 (2015). *COST ES1006 – Model Evaluation Case Studies*, COST Action ES1006, April 2015, Distributed by: University of Hamburg, Meteorological Institute, Bundesstraße 55, D – 20146 Hamburg, Germany, ISBN: 987-3-9817334-2-6
- COST ES1006 (2012). *Background and Justification Document*, COST Action ES1006, May 2012, University of Hamburg, Meteorological Institute, Bundesstraße 55, D – 20146 Hamburg, Germany. ISBN: 3-00-018312-X.
- Carpentieri, M., Hayden, P., Robins, A.G. (2012). *Wind tunnel measurements of pollutant turbulent fluxes in urban intersections*. Atmos. Environ. 46, 669-674.
- Cermak, J.E., Davenport, A.G., Plate, E.J., Viegas, D.X. (1995). *Wind Climate in Cities*, Proc. NATO Adv. Study Institute, July 5-16, 1993, Germany, NATO ASI Series E 277, 1995 Kluwer Acad. Pub., Dordrecht, Netherlands.
- Chang, J.C., M.E. Fernau, J.S. Scire, and D.G., Strimaitis (1998). *A Critical Review of Four Types of Air Quality Models Pertinent to MMS Regulatory and Environmental Assessment Missions*. Prepared for U.S. Department of the Interior, Minerals Management Service, Gulf of Mexico OCS Region, 1201 Elmwood Park Blvd., New Orleans, LA 70123, by Earth Tech, Inc., 196 Baker Avenue, Concord, MA 01742.
- Deck, S. (2005). *Zonal-detached-eddy simulation of the flow around a high-lift configuration*. AIAA J. 43 (11), 2372-2384.
- Denby, B. R., Gauss, M., Wind, P., Mu, Q., Grøtting Wærsted, E., Fagerli, H., Valdebenito, A., and Klein, H. (2020). *Description of the uEMEP_v5 downscaling approach for the EMEP MSC-W chemistry transport model*, Geosci. Model Dev., 13, 6303–6323, <https://doi.org/10.5194/gmd-13-6303-2020>
- Dimitrova R, Velizarova M. (2021). *Assessment of the Contribution of Different Particulate Matter Sources on Pollution in Sofia City*. Atmosphere. 12(4):423. <https://doi.org/10.3390/atmos12040423>
- Drivas, P.J., Shair, F.H. (1974). *Probing the airflow within the wake downwind of a building by means of a tracer technique*. Atmos. Environ. 8, 1165-1175.
- Duncan, D. (2011). *Influence of pavement type on near surface air temperature*. PhD Thesis, Paper 1277. Tiger prints, Clemson University, South Carolina, USA.
- EC Directive (2008). *Directive 2008/50/EC of the European Parliament and of the Council of 21 May 2008 on Ambient Air Quality and Cleaner Air for Europe* (No. 152), Official Journal.
- EEA (2016). *Air Quality in Europe – 2016 report*, EEA Report No.28/2016, Luxembourg Publ. Office of the EU, ISBN 978-92-9213-847-9.
- Easom, G. (2000). *Improved Turbulence Models for Computational Wind Engineering*. School of Civil Engineering, University of Nottingham, England. Ph.D thesis.

- Eder, B.K., Coventry, D.H., Clark, T.L., Bollinger, C.E. (1986). *Relmap: A regional Lagrangian model of air pollution user's guide*. Research Triangle Park, NC: US EPA, Atmospheric science research laboratory, 1986. Print. Report Nrs. PB-86-171394/XAB; EPA/600/8-86/013
- Fischer, R., Bastigkeit, I., Leitl, B., Schatzmann, M. (2010). *Generation of spatio-temporally high resolved datasets for the validation of LES-models simulating flow and dispersion phenomena within the lower atmospheric boundary layer*. Proc. 5th International Symposium on Computational Wind Engineering (CWE2010), Chapel Hill, North Carolina, USA.
- Franke, J., Hellsten, A., Schlünzen, H., Carissimo, B., Baklanov, A., Barmpas, P., Bartzis, J., Batchvarova, E., Baumann-Stanzer, K., Berkowicz, R., Borrego, C., Britter, R., Brzozowski, K., Burzynski, J., Costa, A.M., et al. (2007). *Best practice guideline for the CFD simulation of flows in the urban environment*. COST Action 732: Quality assurance and improvement of microscale meteorological models. COST Office Brussels, ISBN 3-00-018312-4, 51 pp.
- Gadzhev, G., Georgieva, I., Ganey, K., and Miloshev, N. (2018). *Contribution of different emission sources to the atmospheric composition formation in the city of Sofia*, Int. J. Environment and Pollution, 64 (1-3), pp. 47–57 DOI: 10.1504/IJEP.2018.099146
- Garratt, J.R. (1980). *Surface influence upon vertical profiles in the nocturnal boundary layer*. Boundary-Layer Meteorology Volume 26, Number 1, pp. 69-80.
- Georgieva E, Syrakov D, Atanassov D, Spassova T, Dimitrova M, Prodanova M, Veleva B, Kirova H, Neykova N, Neykova R, et al.(2021). *Use of Satellite Data for Air Pollution Modeling in Bulgaria*. Earth. 2(3):586-604. <https://doi.org/10.3390/earth2030034>
- Georgieva, I., Gadzhev, G., Ganey, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Miloshev, N. (2015). *Numerical study of the air quality in the city of Sofia, Some preliminary results*, Int. J. Environment and Pollution, 57 (3-4), pp. 162-174. DOI: 10.1504/IJEP.2015.074500
- Gergely, K., Rácz, N., Balogh, M. (2007). *Application of ANSYS-FLUENT for meso-scale atmospheric flow simulations*. ANSYS Conference & 25th CADFEM Users' Meeting 2007, November 21-23, 2007 Congress Center Dresden, Germany.
- Gifford, Jr., F.A. (1976). *Consequences of Effluent Releases*. Nuclear Safety 17(1): 68-86.
- Gomes, M.S.P., Isnard, A.A., Pinto, J.M.C. (2007). *Wind tunnel investigation on the retention of air pollutants in three-dimensional recirculation zones in urban areas*. Atmos. Environ. 41 (23), 4949-4961.
- Gousseau, P., Blocken, B., Stathopoulos, T., Van-Heijst, G.J.F. (2015). *Near-field pollutant dispersion in an actual urban area: analysis of the mass transport mechanism by high-resolution large eddy simulations*. Comput. Fluids 114, 151-162.
- Grawe, D., Schlünzen, K. H., Pascheke, F. (2013). *Comparison of results of an obstacle resolving microscale model with wind tunnel data*. Atmospheric Environment, 79, 495-509
- Gromke, C., Buccolieri, R., Di Sabatino, S., Ruck, B. (2008). *Dispersion study in a street canyon with tree planting by means of wind tunnel and numerical investigations – Evaluation of CFD data with experimental data*, Atmospheric Environment, Volume 42, Issue 37, 2008, Pages 8640-8650, ISSN 1352-2310, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2008.08.019>.
- Gromke, C. B., (2013). *CODASC: a database for the validation of street canyon dispersion models*. Proceedings of the 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (HARMO), May 6-9, 2013, Madrid, Spain
- Hanna, S., Chang, J. (2012). *Acceptance criteria for urban dispersion model evaluation*. Meteorology and Atmospheric Physics 116:3-4, 133-146.
- Hanna, S.R., J.C. Chang, and D.G. Strimaitis, (1993). *Hazardous gas model evaluation with field observations.*, Atmos. Environ. , 27A , 2265-2285.
- Hoxey, R.P., Richards, P.J., Short, J.L. (2005). *A 6 m cube in an atmospheric boundary layer flow*. Part 1: full-scale and wind-tunnel results. Wind Struct. 5, 165-176.
- Ivanov V, Georgieva I. (2021). *Basic Facts about Numerical Simulations of Atmospheric Composition in the City of Sofia*. Atmosphere. 12(11):1450. <https://doi.org/10.3390/atmos12111450>
- Janicke, U., Janicke, L. (2007). *Lagrangian particle modeling for regulatory purposes; A survey of recent developments in Germany*. Proceedings of the 11th International Conference on Harmonization within Atmospheric Dispersion Modeling for Regulatory Purposes, Cambridge, England. <http://www.harmon.org>.
- Jeanjean, A.P.R., Hinchliffe, G., McMullan, W.A., Monks, P.S., Leigh, R.J. (2015). *A CFD study on the effectiveness of trees to disperse road traffic emissions at a city scale*, Atmospheric Environment 120 (2015) 1-14, Elsevier Ltd.

- Jones, R., Lehr, W., Simecek-Beatty, D., Michael Reynolds, R. (2013). *ALOHA® (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.4.4: Technical Documentation*. U. S. Dept. of Commerce, NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 43. Seattle, WA: Emergency Response Division, NOAA. 96 pp.
- Lateb, M., Masson, C., Stathopoulos, T., Bedard, C. (2010). *Numerical simulation of pollutant dispersion around a building complex*. *Build. Environ.* 45 (8), 1788-1798.
- Lateb, M., Meroney, R.N., Yataghene, M. et al. (2016). *On the use of numerical modelling for near-field pollutant dispersion in urban environments – a review*. *Environmental Pollution* 208 (2016) 271 – 283, Elsevier Ltd., <http://dx.doi.org/10.1016/j.envpol.2015.07.039>
- Lazar, R., Podesser, A. (1999). *An urban climate analysis of Graz and its significance for urban planning in the tributary valleys east of Graz (Austria)*, *Atmospheric Environment* 33 (1999) 4195-4209;
- Li, W.W., Meroney, R.N. (1983). *Gas dispersion near a cubical model building: Part II. Concentration fluctuation measurements*. *J. Wind Eng. Indus. Aerodynamics* 12 (1), 35-47.
- Lien, F.S., Yee, E., Ji, H., Keats, A., Hsieh, K.J. (2006). *Progress and challenges in the development of physically-based numerical models for prediction of flow and contaminant dispersion in the urban environment*. *Int. J. Comput. Fluid Dyn.* 20(5), 323-337.
- Liu, X.P., Niu, J.L., Kwok, K.C.S., Wang, J.H., Li, B.Z. (2010). *Investigation of indoor air pollutant dispersion and cross-contamination around a typical high-rise residential building: wind tunnel tests*. *Build. Environ.* 45 (8), 1769-1778.
- Maronga, B., Gryscha, M., Heinze, R., Hoffmann, F., Kanani-Sühring, F., Keck, M., Ketelsen, K., Letzel, M. O., Sühring, M., and Raasch, S. (2015). *The Parallelized Large-Eddy Simulation Model (PALM) version 4.0 for atmospheric and oceanic flows: model formulation, recent developments, and future perspectives*, *Geosci. Model Dev.*, 8, 1539-1637, DOI:10.5194/gmd-8-2515-2015
- Menut, L., Bessagnet, B., Briant, R., Cholakian, A., Couvidat, F., Mailler, S., Pennel, R., Siour, G., Tuccella, P., Turquety, S., and Valari, M. (2021). *The CHIMERE v2020r1 online chemistry-transport model*, *Geosci. Model Dev.*, 14, 6781–6811, <https://doi.org/10.5194/gmd-14-6781-2021>
- Meroney, R.N., Hill, D.W., Derickson, R., Stroup, J., Weber, K., Garrett, P. (2015). *CFD simulation of ventilation and smoke movement in a large military firing range*. *J. Wind Eng. Indus. Aerodynamics* 136, 12-22.
- Musalaiah, M., Venkata, R.P., Liyakath, A., Zakir, H. (2013). *A review on theoretical air pollutants dispersion models*. *International Journal of Pharmaceutical. Chem. Biol. Sci.* 3 (4), 1224-1230.
- Nakiboglu, G., Gorle, C., Horvath, I., Beeck, J.V., Blocken, B. (2009). *Stack gas dispersion measurements with large scale-PIV, aspiration probes and light scattering techniques and comparison with CFD*. *Atmos. Environ.* 43 (21), 3396-3406.
- Nappo, C.J., R.M. Eckman, K.S. Rao, J.A. Herwehe, and R.L. Gunter, (1998). *Second Order Closure Integrated Puff (SCIPUFF) Model Verification and Evaluation Study*. NOAA Technical Memorandum ERL ARL-227, Air Resources Laboratory, National Oceanic and Atmospheric Administration, Silver Spring, MD.
- Neykov, N., Neykova, N., Petrov, A., Spassova, T., Branzov, H., Nikolov, V. (2023). *Forecasting Hourly NO₂ and O₃ Concentrations Using Data Analytics Models at Pavlovo Station in Sofia*. In: Dobrinkova, N., Nikolov, O. (eds) *Environmental Protection and Disaster Risks. EnviroRISks 2022. Lecture Notes in Networks and Systems*, vol 638. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-26754-3_24
- Oettl, D. (2019). *Documentation of the Lagrangian Particle Model GRAL (Graz Lagrangian Model) Vs. 20.1*, Government of Styria Department 15 Energy, Housing, Technology, Air Quality Control, Landhausgasse 7, 8010 Graz, Austria
- Oke, T.R. (1987). *Boundary Layer Climates*, 2nd edn. London: Methuen, 435 pp.
- Pantusheva M, Mitkov R, Hristov P.O., Petrova-Antonova D. (2022). *Air Pollution Dispersion Modelling in Urban Environment Using CFD: A Systematic Review*. *Atmosphere.* 13(10):1640. <https://doi.org/10.3390/atmos13101640>
- Pasquill, F. (1961). *The Estimation of the Dispersion of Windborne Material*. *Meteorology Magazine* 90(1063): pp. 33-40.
- Petrov, A. (2019). *Evaluation of OpenFOAM against CODASC wind tunnel database and impact of heating on the flow in an idealised street canyon*. *Int. Journal of Environment and Pollution* 65(1/2/3):149, DOI: 10.1504/IJEP.2019.101838
- Plainiotis, S., Pericleous, K.A., Fisher, B.E.A., Shier, L. (2005). *Forward and inverse transport of particulate matter and gaseous pollutants affecting the region bordering the English channel*. *Proceedings of the 16th IASTED International Conference on Modelling and simulation (MS-2005)* pp. 164-169
- Poreh, M., Cermak, J.E. (1990). *Small scale modeling of line integrated concentration fluctuations*. *J. Wind Eng. Indus. Aerodynamics* 36, 665-673.

- Rakai, A. and Kristof, G. (2013). *Microscale Obstacle Resolving Air Quality Model Evaluation with the Michelstadt Case*. The Scientific World Journal, Volume 2013, Article ID 781748, 11 pages, <http://dx.doi.org/10.1155/2013/781748>.
- Ratcliff, M.A., Sandru, E. (1999). *Dilution Calculations for Determining Laboratory Exhaust Stack Height*. American Society of Heating, Refrigerating and Air-conditioning Engineering (ASHRAE), Atlanta, United States. CH-99-7-1.
- Richards, P.J., Hoxey, R.P (1993). *Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the k-ε turbulence model*. J Wind Eng Ind Aerodyn, 1993;46&47:145-153.
- Rock, B.A., Moylan, K.A., (1999). *Placement of ventilation air intakes for improved IAQ*. ASHRAE Trans. 105 (1), 1-9.
- Rodriguez, L.M., Bieringer, P.E., Warner, T. (2013). *Urban transport and dispersion model sensitivity to wind direction uncertainty and source location*. Atmos. Environ. 64, 25-39.
- Rotach, M.W. (1993). *Turbulence close to a rough urban surface part II: variances and gradients*. Boundary-Layer Meteorol. 66 (1-2), 75-92.
- Saathoff, P., Stathopoulos, T. (1997). *Dispersion of exhaust gases from roof-level stacks and vents on a laboratory building: discussion*. Atmos. Environ. 31 (7), 1087-1089.
- Seinfeld, J.H., and Pandis, S.N. (1998). *Atmospheric Chemistry and Physics*, Wiley Interscience publication, New York, 1326 pp.
- Srivastava, A., Rao, S. (2011). *Urban Air Pollution Modeling, Air Quality Models and Applications*, Popovic, D. (ed.), www.intechopen.com/books/air-quality-models-and-applications/urban-air-pollution-modeling
- Stathopoulos, T., Hajra, B., Bahloul, A., (2008). *Analytical Evaluation of Dispersion of Exhaust from Rooftop Stacks on Buildings*. Institut de recherche Robert-Sauvé en santé et en sécurité du travail (IRSST), Montreal, Canada. Report-576.
- Stohl, A., M. Hittenberger, and G. Wotawa (1998): *Validation of the Lagrangian particle dispersion model FLEXPART against large scale tracer experiments*. Atmos. Environ. 32, 4245-4264.
- Stull, R.B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, 670 pp.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Etropolska, I., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov, T. (2014). *A Multi-Domain Operational Chemical Weather Forecast System*. In: Lirkov I. et al. (eds.) Large-Scale Scientific Computing, LNCS 8353, 413–420. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Trini Castelli, S., Baumann-Stanzer, K., Leitl, B., Berbekar, E., Rakai, A., Fuka, V., Hellsten, A., Milliez, M., Petrov, A., Efthimiou, G., Andronopoulos, S., Tinarelli, G., Tavares, R., Armand, P., Gariazzo, C., Jurcakova, K., Gašparac, G., Nibart, M., (2016). *Evaluation of local-scale models for accidental releases in built environments – results of the modelling exercises in COST Action ES1006*. Air Pollution Modeling and its Application XXIV, D. Steyn and N. Chaumerliac (eds.) Springer Proceedings in Complexity, Springer International Publishing Switzerland, https://doi.org/10.1007/978-3-319-24478-5_79
- Tseng, Y.H., Meneveau, C., Parlange, M.B. (2006). *Modeling flow around bluff bodies and predicting urban dispersion using large-eddy simulation*. Environ. Sci. Technol. 40 (8), 2653-2662.
- Vardoulakis, S., Dimitrova, R., Richards, K., Hamlyn, D., Camilleri, G., Weeks, M., Sini, J.-F., Britter, R., Borrego, C., Schatzmann, M., Moussiopoulos, N., (2011). *Numerical model inter-comparison for wind flow and turbulence around single block buildings*. Environmental Modelling & Assessment 16, 169-181.
- Waeytens, J., Durand, S., Sadr, S., (2019). *Experimental validation of a CFD-based air quality sensor placement strategy to localize indoor source emissions*. Building Simulation 2019, Sep 2019, Rome, Italy. 6p.
- Weil, J.C., Sullivan, P.P., Patton, E.G., Moeng, C.-H. (2012). *Statistical variability of dispersion in the convective boundary layer: ensembles of simulations and observations*. Boundary-Layer Meteorol. 145, 185-210.
- White, B.R., (2003). *Wind-tunnel Study of Atmospheric Dispersion of Near-field Exhaust from a Stack*. American Society of Heating, Refrigerating and Air-conditioning Engineering (ASHRAE), Atlanta, United States. IN-91-3-5.
- Wood, C.R., Lacser, A., Barlow, J.F., Padhra, A., Belcher, S.E., Nemitz, E., Helfter, C., Famulari, D., Grimmond, C.S.B. (2010). *Turbulent flow at 190 m height above London during 2006–2008: a climatology and the applicability of similarity theory*. Boundary-Layer Meteorol 137(1):77–96
- Yassin, M.F., 2013. *A wind tunnel study on the effect of thermal stability on flow and dispersion of rooftop stack emissions in the near wake of a building*. Atmos. Environ. 65, 89-100.
- Yoshie, R., Jiang, G., Shirasawa, T., Chung, J. (2011). *CFD simulations of gas dispersion around high-rise building in non-isothermal boundary layer*. J. Wind Eng. Indus. Aerodynamics 99 (4), 279-288.
- Zannetti, P. (1990). *Lagrangian Dispersion Models*. In: *Air Pollution Modeling*. Springer, Boston, MA. https://doi.org/10.1007/978-1-4757-4465-1_8

- Андреев, В., Александров, В., Бъчварова, Е. (2010). *Актуални рискови явления в атмосферата*, София, 2010, Деметра ЕООД, 99-122.
- КАВ Бургас (2021). *Програма за подобряване качеството на атмосферния въздух на община Бургас за периода 2021-2027 г.* <https://www.burgas.bg/bg/programi/predvariteln-variant-na-programa-za-podobryavane-kachestvoto-na-atmosferniya-vazduha-na-obshtina-burgas-za-perioda-2021-2027-g/>
- КАВ София (2020). *Комплексна програма за подобряване качеството на атмосферния въздух на територията на Столична община за периода 2021-2026.* <https://www.sofia.bg/components-environment-air>
- Сираков, Е. (2011). *Атмосферен Граничен Слой: Структура, Параметризация, Взаимодействия*, Heron Press Ltd., Sofia, 394 pp.