

ADOMAS MAŽEIKIS

**KIETŪJŲ DALELIŲ PERNAŠOS TYRIMAI
ATMOSFEROJE SILAM MODELIU**

2008

Vilniaus universitetas
Hidrologijos ir klimatologijos katedra

Įvertinimas

KIETŪJŲ DALELIŲ PERNAŠOS TYRIMAI ATMOSFEROJE
SILAM MODELIU

Magistro darbas

Hidrometeorologijos
studijų programos
Magistrantūros II kurso studento
Adomo Mažeikio

Darbo vadovai
Dr. Justas Kažys
Paulius Jalinskas

VILNIUS, 2008

TURINYS

DARBE NAUDOJAMOS SANTRUMPOS	3
ĮVADAS	4
Darbo tikslai ir uždaviniai	5
1. LITERATŪROS APŽVALGA	6
2. KIETŪJŲ DALELIŲ PERNAŠOS ATMOSFEROJE TYRIMAI SILAM MODELIU ..13	
2.1 SILAM modelio aprašymas.....	13
2.2 Darbe naudoti duomenys	15
2.2.1 Emisijos duomenys	16
2.2.2 Meteorologiniai duomenys	24
2.3 Bendrieji modelio nustatymai.....	27
2.4 Gaisro AB „Mažeikių nafta“ (2006-10-12) modeliavimas.....	31
2.5 Modelio veiklos ataskaitos	32
2.6 Sumodeliuota vidutinė kietųjų dalelių (KD10) koncentracija ore (2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.).....	35
2.7 Sumodeliuota maksimali kietųjų dalelių (KD10) koncentracija ore (2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.).....	42
2.8 Kietųjų dalelių (KD10) išplovimas ir nusėdimas (2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.).....	44
2.9 Išskirtiniai KD10 pernašos atvejai.....	46
IŠVADOS	50
LITERATŪRA	52
SUMMARY	55
Priedai	57

DARBE NAUDOJAMOS SANTRUMPOS

KD10 - kietosios dalelės, kurių aerodinaminis skersmuo neviršija 10 mikrometrų.

HIRLAM - aukštos skiriamosios gebos, ribotos teritorijos modelis (angl. *High Resolution Limited Area Model*).

ECMWF - europos vidutinės trukmės orų prognozių centras (angl. *European Center for Medium range weather Forecasting*).

IPAT - Poveikis, Populiacija, Gausa, Technologijos. Santrumpos iš civilizacijos vystymosi lygties (angl. *Impact Population Affluence Technology*).

EMEP - Bendradarbiavimo programa tolimų oro teršalų pernašų monitoringui ir vertinimui (angl. *Cooperative Programme for Monitoring and Evaluation of the Long-range Transmission of Air Pollutants in Europe*).

GEIS - *General Electric* korporacijos informacijos paslaugų padalinys (angl. *General Electric Information Services*).

GRIB - tinklelinis dvejetainis duomenų formatas (angl. *Gridded binary*).

ETEX - Europos (pėdsakinių dujų) sekimo eksperimentas (angl. *European Tracer Experiment*).

Kz - *Kolmogorov-Zakharov* turbulencijos rodiklis.

ĮVADAS

Atmosferos tarša egzistuoja nuo priešistorinių laikų tik jos kilmė buvo geologinė, astronominė arba įtakota tokių atsitiktinių įvykių kaip žaibo pradėtas miško gaisras. Vulkaninė veikla, meteoritų smūgiai į žemės paviršių — reti, bet svarbūs reiškiniai, kurių metu į atmosferą patenka ne tik gausybė įvairių cheminių junginių, bet ir kietųjų dalelių.

Vos žmogui išmokus užiebtį ugnį atsirado dar vienas atmosferos taršos šaltinis — žmogaus ūkinė veikla (antropogeninis veiksnys). Iki XVII amžiaus žmogaus veikla intensyvėjo palengva ir išmetamų į atmosferą teršalų kiekis bei atmosferos sudėtis beveik nekito. Prasidėjus industrializacijos periodui emisijos augimas ėgavo pagreitį ir apie padarinius rimtai buvo susimąstyta tik praeito amžiaus viduryje.

Padidėjęs „šiltnamio dujų“ kiekis, suplonėjęs ozono sluoksnis, intensyvejanti cikloninė veikla ir auganti globali temperatūra yra tik dalis pasekmių, kurių priežastis — atmosferos tarša. Nemažiau svarbu yra prastėjančios oro kokybės padariniai gyvajai gamtai, tame tarpe ir žmogui. Atsirado poreikis tirti ir prognozuoti atmosferos taršą.

Dabartiniai ekonominiai ir technologiniai pajėgumai leidžia naudotis itin didelę spartą turinčiais kompiuteriais ne tik didžiosioms valstybėms, bet net ir mažesniems administraciniams vienetams bei privataus kapitalo įmonėms. Atmosferos taršos modeliavimas jau senokai virtęs pasiekiamą ranka realybe, bet pakankamai detalius duomenis, leidžiančius prognozuoti ne tik mezo, bet ir makro mastais, išvedantys modeliai atsirado visai neseniai (mikro mastais veikiantys modeliai atsirado maždaug tuo pačiu metu, kaip ir mezo mastais, nes skaičiavimų kiekis ir sudėtingumas labai panašus).

Vienas tokių modelių yra Suomijos meteorologijos instituto (*Finnish Meteorological Institute*) sukurtas SILAM. Šio modelio veikimui naudojamos Lagranžo lygtys (nuo paskutiniosios versijos galima pasirinkti ir Eulerio lygčių naudojimo režimą) ir Monte Carlo „atsitiktinių kelių“ algoritmas. Pirminė modelio paskirtis buvo radioaktyvių medžiagų dispersijos modeliavimas ir gautos spinduliuotės nustatymas avariniu atveju, tačiau modelio architektūra suteikia galimybes beveik neribotai modeliuoti atmosferos taršos sklidimą, jų tarpusavio reakcijas, gaunamus produktus, „sausą“ ir „šlapią“ taršos iškritimą. Bene vienintelis netikslumas modelyje yra „plokščio žemės paviršiaus“ naudojimas (List, classification and..., 2006).

Teoriškai, naudojant SILAM, galima modeliuoti bet kokios medžiagos sklidimą atmosferoje, bet tai gali pareikalauti pernelyg didelių techninių resursų arba modelio parengimas užtruktų ilgiau nei prognozavimas naudojantis kitomis priemonėmis. Faktiškai,

SILAM modeliu, prognozuojama net 496 radioaktyvių medžiagų, SO₂, SO₄, kietųjų dalelių (įvairių diametru) ir net alergenu dalelių (pavyzdžiui beržų žiedadulkių) dispersija.

Modeliavimui reikalingas pakankamai galingas kompiuteris su UNIX tipo operacine sistema. Pats SILAM modelis veikia ir kitose aplinkose, bet pastebimai lėčiau. Kita būtina sėkmingo modeliavimo sąlyga - tinkami įvesties duomenys. Kadangi teršalų dispersijos modeliavimui labai reikšmingos meteorologinės sąlygos, tai bene pagrindiniai įvedami duomenys yra atmosferos parametrai ir jų prognozės (pavyzdžiui iš HIRLAM ar ECMWF modelių).

Lietuvoje yra sąlygos efektyviam modelio darbui bei poreikis modeliuoti ir prognozuoti atmosferos teršalų sklaidimą, todėl šio darbo rezultatas ir darbo metu sukurta modelio nustatymo metodika galėtų būti plačiai naudojami praktikoje. Kol kas nėra gausios informacijos apie atmosferos taršos modeliavimą Lietuvos teritorijoje. Atliekami tik matavimai ir regioniniu bei valstybės mastu naudojami kaimyninių valstybių modeliavimo duomenys, o atskiros savivaldybės teršalų sklaidą atmosferoje modeliuoja mikro masto modeliais.

Esant tokioms aplinkybėms šio darbo rezultatas — kietųjų dalelių taršos pasiskirstymo Lietuvos teritorijoje dėsningumai ir faktiniai modelio rezultatai yra nauji duomenys. Kietųjų dalelių iškritimas įvairiomis formomis ir vidutinė koncentracija ore konkrečiuose taškuose ar teritorijose yra aktualu vertinant aplinkos poveikį ten gyvenantiems ar gyvensiantiems žmonėms.

Darbo tikslai ir uždaviniai

Pagrindinis darbo tikslas yra: ištirti pagrindines kietųjų dalelių pernašos Lietuvos teritorijoje savybes naudojant SILAM modelį, parengtą kietųjų dalelių dispersijos modeliavimui ir prognozavimui Lietuvos teritorijoje bei kuo naujesnius ir kuo gausnesius duomenis iš Lietuvos institucijų (pavyzdžiui Lietuvos hidrometeorologijos tarnybos, Aplinkos ministerijos ir t.t.). Uždaviniai:

- Surinkti reikalingus darbui duomenis ir užtikrinti galimybę naudotis techninėmis galimybėmis reikalingomis modeliavimui;
- Atlikti bandomuosius modeliavimus nustatymų derinimo tikslais;
- Suderinti įvesties duomenų formatą su modelio reikalavimais;
- Atlikti modeliavimą su realiais duomenimis;
- Surinkti pakankamai modeliavimo rezultatų tinkamų kietųjų dalelių pernašai tirti;
- Apibrėžti kietųjų dalelių pernašos Lietuvos teritorijoje savybes;
- Apibendrinti tyrimo rezultatus, pateikti išvadas ir rekomendacijas;

1. LITERATŪROS APŽVALGA

Atmosferos taršos modeliavimo galimybė atsirado visai neseniai, kartu su pakankamai sparčiais ir sudėtingus skaičiavimus atliekančiais kompiuteriais. Teorinė galimybė modeliuoti atmosferos taršą ir, iš principo, panašius procesus atsirado dar Antikos laikais, kai buvo atrasti pirmieji matematiniai tyrimo metodai, bet realiai statistikos žinios pasiekė pakankamą lygį tik XVIII a., kai savo darbus paskelbė tokie mokslininkai kaip Žozefas Luji Lagranžas (*Joseph Louis Lagrange*, 1736—1813), Karlas Frydrichas Gausas (*Carl Friedrich Gauß*, 1777-1855). Net dabartinių modelių pagrindiniai skaičiavimai atliekami būtent šių XVIII a. mokslininkų sukurtais metodais (Metcalf, Derwent, 1989).

Dabartiniai modeliai skirstomi į parametrinius (naudojamos iš anksto apibrėžtos formulės) ir neparimetrinius (naudojamos formulės sudaromos priklausomai nuo pradinių duomenų). Neparimetriniai modeliai labiau tinkami oro taršos modeliavimui dėl savo lankstumo ir tokių savybių kaip pvz.: apatinės kintamojo ribos nebuvimas (Bickel, Lehmann, 1976).

Nemažiau svarbus žingsnis modeliuojant tiek oro taršą, tiek ir nemažai kitų gamtoje vykstančių procesų, yra tinkamų pradinių duomenų parinkimas. Anot Georgijaus Bošnakovo (*Georgi Boshnakov*), ilgo periodo oro taršai tirti imami net medžių rievinių duomenys. Tai puikiai iliustruoja, kad šaltinių iš kur imti duomenis modeliavimui iš tiesų yra gausybė, bet svarbu pasirinkti tinkamus konkrečiam modeliui ir kitoms sąlygoms.

Oro tarša yra labai panaši į nemažai kitų procesų, kuriuose vyksta dispersija ir kaip esminis parametras yra naudojama koncentracija. Grupė Švedijos mokslininkų (Lars-Erik Borgegard, Johan Hakansson, Gunnar Malmberg) tyrinėdami populiacijos dispersiją nustatė nemažai svarbių bruožų, kurie pritaikomi ir oro taršos modeliavime. Keletas pavyzdžių būtų: demografinės situacijos įtaka populiacijos dispersijai, tolygi taršos šaltinių įtakai oro taršos sklidime; populiacijos traukos centrai ir jų „svoriai“ atitiktų slėgio gradientus oro taršos modeliavime, nes traukos centrai formuoja populiacijos srautus, o slėgio gradientai formuoja vėją t.y. dalelių judėjimo srautus. Nepriklausomai nuo aplinkos ir dalelių (nesvarbu ar tai žmonės, ar objektai, ar kietosios dalelės) prigimties modeliavimui naudojami tie patys metodai ir labai mažai besiskiriančios lygtys. Skiriasi, dažniausiai, tik specifiniai parametrai arba vyksta unikalūs aplinkai ar modeliuojamiems objektams procesai (pvz. Teršalų dispersija vandenyje ir atmosferoje iš esmės skiriasi tuo, kad atmosferoje galima teršalų išplovimas, o vandenyje – ne).

Kietųjų dalelių pernašai tirti svarbus dar vienas parametras – vertikali difuzija, kuri, kaip paaiškėjo tyrimų metu (Sofiev, 2002), turi daug panašumų su tam tikromis elektros

grandinėmis. Vertikali difuzija neatsiejama trijų matmenų (neskaitant ketvirtojo – laiko) modelių dalis, nes būtent ši dalis apibrėžia, kaip vertikalėje kinta teršalų koncentracija t.y. kaip teršalai transportuojami vertikalėje. Paprastai, dideliame tikslume palaikyti naudojamas didelis vertikalų sluoksnių skaičius modelyje. Tokiu atveju teršalų koncentracijos vertikalus profilis mažiau diskretizuojamas ir yra tikslesnis, bet toks būdas turi ir trūkumų. Pagrindinis trūkumas – didelis skaičiavimo operacijų skaičius. O tai reikštų, kad esant poreikiui greitai atlikti modeliavimą (pvz. įvyko gaisras dideliame pramoniniame objekte) šis būdas nebetiktų. Kaip alternatyva SILAM dispersijos modelyje naudojamas kitas būdas – išplėstinės varžos analogas t.y. elektros grandinių savybės sulygintos su tam tikrais atmosferos (ypač paribio sluoksnio) parametrais ir gauta nauja vertikali difuzijos schema (kadangi elektros grandinių analoge naudojamos varžos ir kondensatoriai, toliau naujoji vertikali difuzijos schema bus vadinama R-C schema). Vertikalios difuzijos schemai keliami reikalavimai yra:

- Vientisumas (jokių trūkių ar masės deficitų);
- Stabilumas laiko žingsniuose (integruojant klaidas laiko atžvilgiu jos neturėtų augti t.y. neturėtų dėl vertikali difuzijos schemos bėgant laikui nukentėti tikslumas);
- Turi būti kuo tiksliau atspindėtas vertikalus koncentracijos profilis;
- „Skaičiavimo kaina“ turi būti kuo mažesnė.

R-C schemas principas – kaip jau minėta, pakeičiami tam tikri taršos ir atmosferos parametrai į dydžius iš elektros grandinių (pvz. teršalų masė į elementų sukauptą elektros krūvį). Tuomet lygtys gerokai supaprastėja (be to su elektros grandinėmis lengviau atlikti bandymus laboratorijoje, nei su atmosferos ir taršos parametrais – tam tikruose aukščiuose). Galutinis R-C schemas žingsnis – nesudėtinga matrica (1):

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{R_0 C_1} & \frac{1}{R_1 C_2} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{\tau_{i-1}} & -\frac{1}{\tau_i} - \frac{1}{R_{i-1} C_i} & \frac{1}{R_i C_{i+1}} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{1}{\tau_{n-1}} & -\frac{1}{R_{n-1} C_n} \end{bmatrix} \quad (1)$$

R – varža (jei koncentraciją laikysime potencialu, kaip žinoma įtampa yra skirtumas tarp potencialų, tai varža bus koncentracijos kitimo pasipriešinimas t.y. jėga stabdanti teršalų sklaidimo srautus);

C – talpumas (atmosferos sluoksnio talpumas);

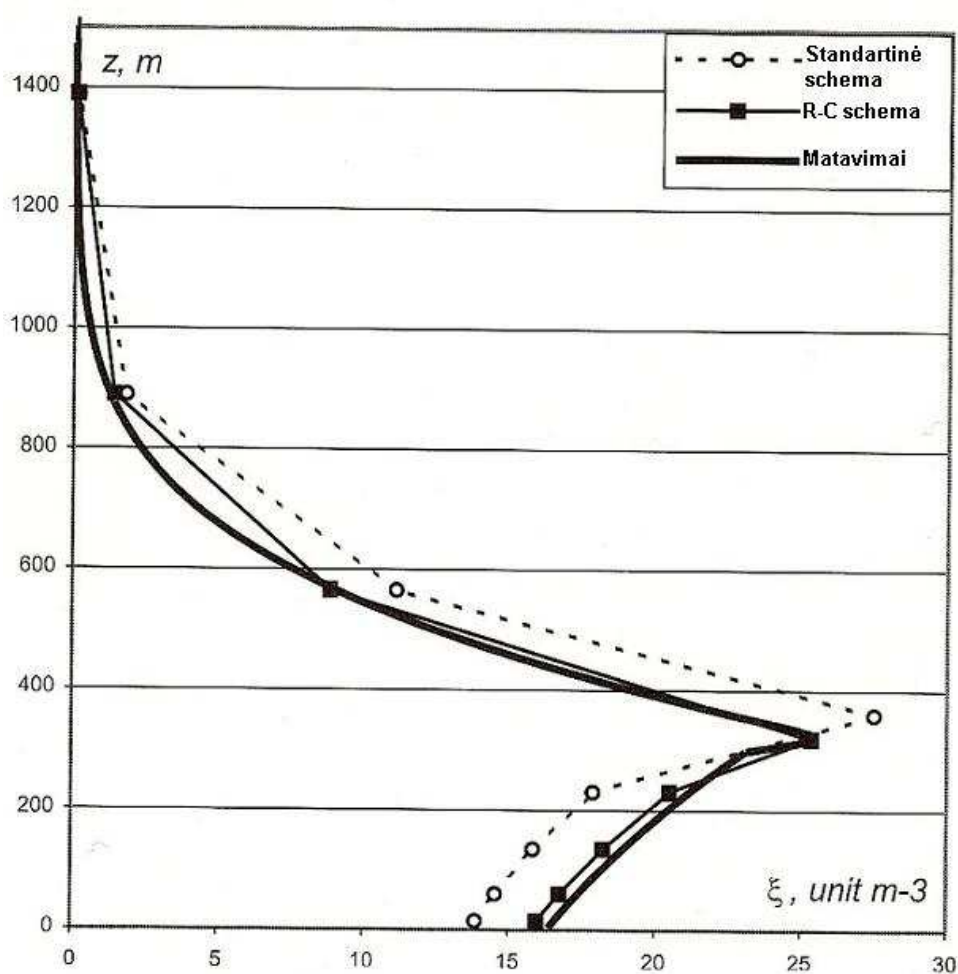
τ – laiko konstanta RC porai.

Tokiai matricai apskaičiuoti reikia gerokai mažiau resursų nei įprastos vertikali difuzijos

schemos diferencialinių (net kelių lygių) lygčių sprendinių radimui.

R-C vertikalios difuzijos schemos rezultatas tikslumu gerokai lenkia standartinę schemą (paremtą vadinamąja K-teorija, apibūdinančia srautus). Be to standartinėje vertikalios difuzijos schemoje dėl naudojamų skaičiavimų būtinos tarpinės erdvės, vektoriai ir su jais susiję operacijos, o tai ypač imlu kompiuterių resursams. Standartinės ir R-C vertikalios difuzijos schemų pritaikymo rezultatai lyginant su matavimais pavaizduoti 2 pav.

Grafikas rodo, kad net po 8 valandų t.y. 8 valandų prognozė į priekį beveik idealiai sutampa su matavimais, kai tuo tarpu standartine vertikalios difuzijos schema paremtos prognozės rezultatai, nors ir nedaug, bet skiriasi. Kaip pavyzdys galėtų būti tai, kad po 48 valandų toks skirtumas gali būti lemtingas t.y. rezultatai jau gali peržengti realybės ribas.



1 pav. Standartinės ir R-C vertikalios difuzijos schemų pritaikymo rezultatai lyginant su matavimais (Sofiev, 2002)

Oro taršos (kaip ir kitų) modelių rezultatai dažnai nebūna tokio tikslumo kokio siekiama, bet yra nemažai būdų, kurių dėka gali būti pasiektas geresnis tikslumas. Vienas svarbiausių ir plačiausiai naudojamų metodų modelių tikslumui gerinti yra Tomo Bajeso

(Thomas Bayes, 1702-1761) darbais paremtas modelių kalibravimo procesas (Kennedy, O'Hagan, 2001; Smith, French, 1993).

Paprasciausi oro taršos ir cheminių medžiagų dispersijos atmosferoje modeliai dažniausiai siejami su dūmų pedsakais paliktais kylančios raketos, kamino dūmų šleifu. Šiems atvejams modeliuoti naudojami Gauso ir eksponentiniai metodai yra ganėtinai nesudėtingi, todėl yra dėstomi ir nemažai universitetų (Jackson, 2000). Be abejo modeliavimo proceso, bei rezultatų skleidimas visuomenei (pirmiausia aukštosiose mokyklose) yra labai svarbus veiksnys tikintis visuomenės paramos ar mokslininkų rekomendacijų laikymosi (Yearley, 1999).

Dž. K. Lindsei (*J. K. Lindsey*) savo darbe „*Models of Repeated Measurements*“ puikiai aprašo gausybę modelių tipų, iš kurių keletas naudojama oro taršos modeliavimui. Autorius taip pat pateikia kai kurias anomalijas, ir jų tikimybes. Kaip pavyzdys būtų tokios sąlygos, kai dauguma teršalų susirenka keliose vietose, o ne sklinda pagal nustatytas taisykles. Tokia anomalija įmanoma esant tam tikrai cheminei oro sudėčiai.

Be matematikos ir statistikos pagrindų, sėkmingam oro taršos modeliavimui yra būtinos ir kitos žinios. Gausybė autorių pateikia bendrų žinių apie atmosferos taršą rinkinius. Bene geriausias jų yra Vilfordo Bacho (*Wilford Bach*) darbas: „*Atmospheric pollution*“. Autorius apžvelgia problemą iš įvairių pozicijų, todėl knyga naudinga ir pradedantiesiems, oro taršos modeliavimo srityje, ir pažengusiems. Viena iš svarbesnių pozicijų – meteorologija. Įvairių atmosferos parametrų ir jų vientisumo oro taršos modeliavime svarbą, aprašo ir L. S. Kalksteinas (*L. S. Kalkstein*) bei Piteris Koriganas (*Peter Corrigan*). Jų teigimu vien statistiniai metodai niekada nebus tokie tikslūs kaip matematikos ir meteorologinių duomenų naudojimas kartu.

Be meteorologinių duomenų ir šiuolaikiškų technologijų bei rafinuotų matematinių metodų be galo svarbus veiksnys oro taršos modeliavime yra geografiniai duomenys: modeliuojamo regiono ilguma, platuma, reljefas. Šiuo atžvilgiu vienas įdomiausių pasaulyje regionų yra Meksiko slėnis, kuriame yra Meksikos sostinė. Tokiose vietose be galo svarbus oro taršos sklidimo modeliavimas. Tuo labiau, kad temperatūros inversijų skaičius turi tendenciją laikui bėgant mažėti (Collins ir Scott, 1993). Pakankamai tikslūs oro taršos modeliavimo rezultatai, tokiose vietose, suteiktų galimybę taikyti įvairius ribojimus, minimaliai pakenkiant ekonomikai ir žmonių gyvenimo kokybei. Dar vienas sudėtingai apdorojamas atvejis yra, kai regionas, kurio oro tarša modeliuojama, turi kalnų slėnius arba pats yra kalno papėdėje. Tokiose vietose labai sunku nustatyti aukštį, kuriame pradeda aktyviai veikti turbulentinės srovės ir vyksta maišymasis. Tokiu atveju mokslininkas Deividas Grynlendas (*David Greenland*) pataria naudoti įvairias modelių kombinacijas. Pavyzdžiui

labai tinka Gauss`o „šleifo“ (kitai „pėdsako“) modelis ir „dėžės“ modelis. Nemažai šiuolaikinių kompiuterinių modelių vienaip ar kitaip išnaudoja tokius kombinavimo metodus.

Vienas iš sudėtingiausiai prognozuojamų veiksnių ilgojo laikotarpio oro taršos modeliavimui yra antropogeninis poveikis, kurį, savo ruožtu, lemia socioekonominiai rodikliai. Kiekvienam šių rodiklių galima atskirai sukurti modelį, todėl itin sunku prognozuoti kokia bus situacija po 10 ar 100 metų. Įmanomi scenarijai apima tiek demografinius šuolius, tiek ir karus, todėl socioekonominių rodiklių prognozavimas yra itin didelį netikslumą duodantis parametras. Bet yra vienas būdas supaprastinti įvairius nuo populiacijos priklausančius emisijos skaičiavimus. Tai vadinamasis IPAT modelis. Paprastas vertimas būtų Poveikis, Populiacijos didėjimas, Perkamoji galia, Technologija (Cramer, 2002). Tokio modelio rezultatai paprastai pateikiami teršalų emisijos (arba koncentracijos ore) pokyčio procentais. To paties Dž. C. Kramerio (*James C. Cramer*) ankstesnis straipsnis „Population Growth and Air Quality in California“ yra labai puikus IPAT modelio naudojimo pavyzdys. Autorius detalai aprašo konkretų praktinio panaudojimo pavyzdį t.y. oro taršos priklausomybę nuo socioekonominių veiksnių Kalifornijos valstijoje, JAV. Straipsnyje pateikiama bendra IPAT formulė: $I = P * A * T$. Be to pateikiamos įvairios formulės variacijos, iliustruojančios efektyvius jos panaudojimo būdus (pavyzdžiui $\ln(I) = b_0 + b_1 * \ln(P) + b_2 * \ln(A) + b_3 * \ln(T) + e$, (Cramer, 1998)).

Remiantis atmosferos taršos modeliavimo ir esamos būklės tyrimų rezultatais sudarinėjami tarptautiniai protokolai ir kuriama taršos mažinimo politika. Mokslininkų grupė (*James C. Murdoch, Todd Sandler, Keith Sargent*) savo straipsnyje „*A Tale of Two Collectives: Sulphur versus Nitrogen Oxides Emission Reduction in Europe*“ aprašo taršos mažinimo politikos ypatumus ir jos poveikį ekonomikai bei atgalinį ryšį t.y. industrijos poveikį atmosferos teršimui. Konkrečiau, ši mokslininkų grupė aprašo Helsinkio ir Sofijos protokolus. Straipsnyje aiškiai matoma, kad nemažą naudą taršos mažinimo politikos kūrimui atnešė ir modeliavimas. Aptariami įvairūs modeliai padedantys rasti optimalų savanoriško ir priverstinio emisijos mažinimo santykį, išsaugant ekonominių parametru augimą. Pagrindinis oro taršos mažinimo politikos „ginklas“ yra emisijos kvotos ir standartai. Atliktų modeliavimų rezultatai rodo, kad optimalūs emisijos standartai yra tokie, kurie nustato ne švelnesnius reikalavimus gausybei medžiagų, bet verčiau griežtesnius vos keletui (Kohn, 1971). Kaip pavyzdys, mokslininkų pateikiama situacija, kai modeliuojant nustatytus reikalavimus 5 ppm anglies monoksidui, 3.1 ppm angliavandeniliams, 0.069 ppm NO_x ir 70 μg/m³ kietosioms dalelėms, gautas rezultatas parodė, kad tokių standartų laikymuisi reikėtų gerokai daugiau lėšų nei nustatant vos viena griežtesnį standartą vienai medžiagai t.y. 0,03 ppm anglies dioksidui (Kohn, 1971). Be abejo labai svarbus ir lėšų panaudojimo

efektyvumas. Kaip rodo tyrimai, lėšų įsisavinimo efektyvumas, taršos mažinimo srityje, nuolat kyla (Taggart, 1985).

Viena iš opiausių bėdų yra kietųjų dalelių koncentracija miesto teritorijoje, kuri esant nepalankioms sąlygoms gali gerokai viršyti ir sanitarines ir jau pavojingas formas. Miesto atmosferos teršalų koncentracijos tyrimai ir modeliavimas yra aktuali problema ir ją stengiasi išspręsti vis daugiau mokslininkų. Bene labiausiai čia pasižymėję yra JAV mokslininkai (pavyzdžiui F. D. Mušetas (*F. Douglas Muschett*), gana detaliai aprašantis ir miesto atmosferoje vykstančius procesus ir jų padarinius). Turint palankias sąlygas ir galybę reikalingos aparatūros jiems nesunku atlikti tyrimus, deja, Europoje, o ypač Lietuvoje tokie tyrimai, o ypač modeliavimas nėra nei labai dažni, nei duodantys naudingų rezultatų. Kadangi didžiausią kietųjų dalelių procentą sukuria transportas (išskyrus retas išimtis, kaip cemento gamyklos, statybų objektai) natūralu, kad planuojant jo išdėstymą svarbus ir atmosferos taršos modeliavimas. Transporto poveikį oro kokybei aprašo Dž. L. Horovicas (*Joel L. Horowitz*) savo knygoje „*Air Quality Analysis for Urban Transportation Planning*“. Autorius pateikia ne tik sausus techninius duomenis, bet ir konkretesnius pavyzdžius.

Vertėtų atkreipti dėmesį ir į truputį kitokius modelius liečiančios oro taršos temą. Bene naudingiausias jau buvo paminėtas t.y. oro kokybės gerinimo poveikis biudžetui. Dar vienas panašus modelis (unikalus tuo, kad tiriama priklausomybė nuo vieno vienintelio stochastinio kintamojo) yra Roberto E. Kono (*Robert E. Kohn*) aprašomas oro kokybės gerinimo efektyvumo kainos atžvilgiu modelis. Tokie modeliai nemažiau naudingi negu klasikiniai koncentracijų prognozių modeliai. Taip yra todėl, kad prognozės yra naudingos, bet žvelgiant į rezultatus oro kokybės gerinimo sprendimas nėra akivaizdus. O jei toks ir yra, tai įmanoma, kad jo nauda nėra tokia didelė, kad vertėtų panaudoti tiek lėšų kiek jis reikalauja. Kainos efektyvumo tipo modeliai yra tiek ir sprendimų „sufleriai“, tiek ir lėšų taupytojai.

Kaip gerą atmosferos teršalų koncentracijos modelį verta paminėti Hull'o rūgščių lietu modelį. Net su jo sukūrimo metu esančia technika buvo pasiektas neblogas tiems laikams tikslumas: 100 x 100 km. Modelį detaliau aprašo Sara Metkalf (*Sarah Metcalfe*) ir Dankanas Vyatas (*Duncan Whyatt*) savo straipsnyje apie rūgščius lietus.

Modelių verifikacija nemažiau svarbi nei kalibracija. Dažnai modelių verifikacijai naudojami netiesioginiai (vadinamieji *proxy* metodai). Pavyzdžiui apie kietųjų dalelių sklidimą galima gauti informacijos net iš žiedadulkių. Deja, ir šiame, viename galutinių, modeliavimo etape pasitaiko klaidų. Vienas jų yra fitotoksinų nepatikimumas (Smith, Fowler ir Cape, 1989).

Bendras žinių kiekis, susijęs su oro tarša ir jos modeliavimu, šiuo metu yra pakankamas ir gal net pernelyg gausus tam, kad išnaudoti pasiektas technologines aukštumas ir sukurti modelius dirbančius greičiau, tiksliau ir naudingiau. Todėl tikėtina, kad bėgant laikui oro taršos modeliai sparčiai tobulės.

2. KIETŪJŲ DALELIŲ PERNĄŠOS ATMOSFEROJE TYRIMAI SILAM MODELIU

2.1 SILAM modelio aprašymas

SILAM – tai trijų matmenų vidutinio mąsto dispersijos modelis, gebantis modeliuoti ~500 įvairių teršalų. Modelio veikimui būtini meteorologiniai ir emisijos duomenys, atitinkanti reikalavimus techninė įranga ir modeliavimo reikalavimus (periodas, teritorija ir t.t.) atitinkantys nustatymai.

Emisijos įvesties duomenys gali būti labai įvairūs:

- EMEP duomenys (teršalų masė iš apibrėžto ploto);
- GEIS duomenys (elektrinių kuro sąnaudos);
- Nacionalinė emisijos apskaita;
- Taškinių emisijos šaltinių duomenys;
- Jei modeliuojama radioaktyvių medžiagų dispersija, tai branduolinio sprogo duomenys;
- Miškų masyvų duomenys alergenų sklidimui modeliuoti ir prognozuoti.

Tuo tarpu išvesties duomenys yra modeliavimui pasirinktos medžiagos koncentracija apibrėžtame plote pateikiama programos GRIB formatu, iš kurio, naudojant specializuotą programinę įrangą, nesunku gauti grafinius duomenis.

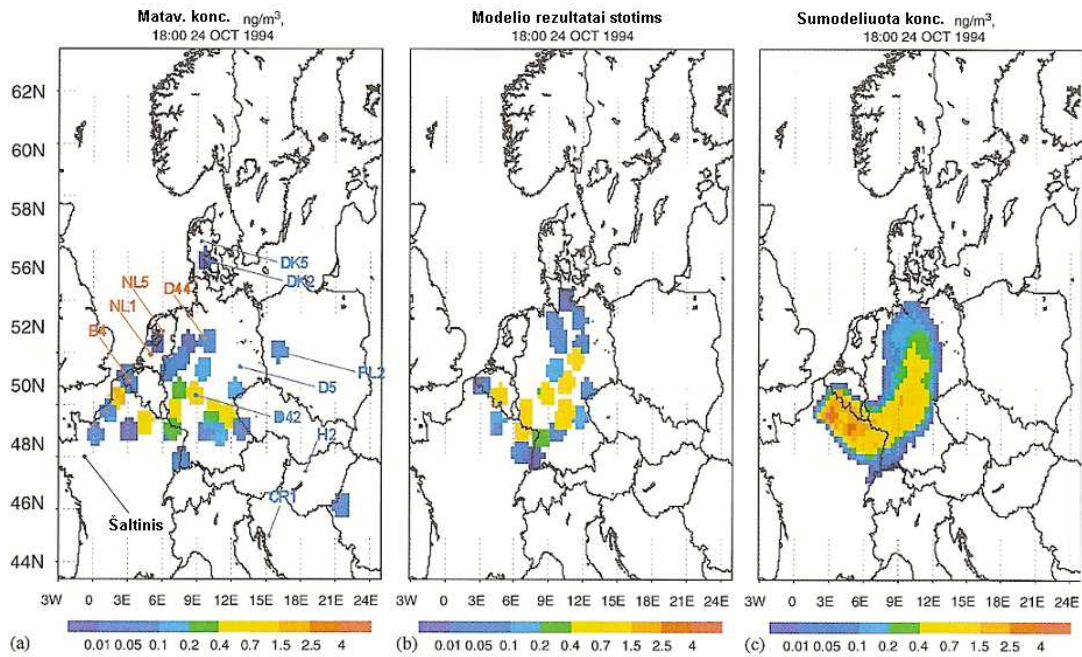
Minimalūs modeliuojamos teritorijos mastai yra 100X100km, o maksimalūs — 10000X10000km (teoriškai mastai neapriboti, bet naudojant mažesnius gaunami realybės neatitinkantys duomenys, o naudojant didesnius — neužtektų skaičiavimo resursų). Kadangi, SILAM yra trimatis modelis, tai viršutinė modeliavimo riba sutampa su pateikiamų meteorologinių duomenų viršutine riba.

Tinklelio ląstelių minimalus dydis 1X1km, o maksimalus — 50X50km. Tuo tarpu minimalus sluoksnių aukštis yra 10m, o maksimalus —1000m (List, classification and..., 2006).

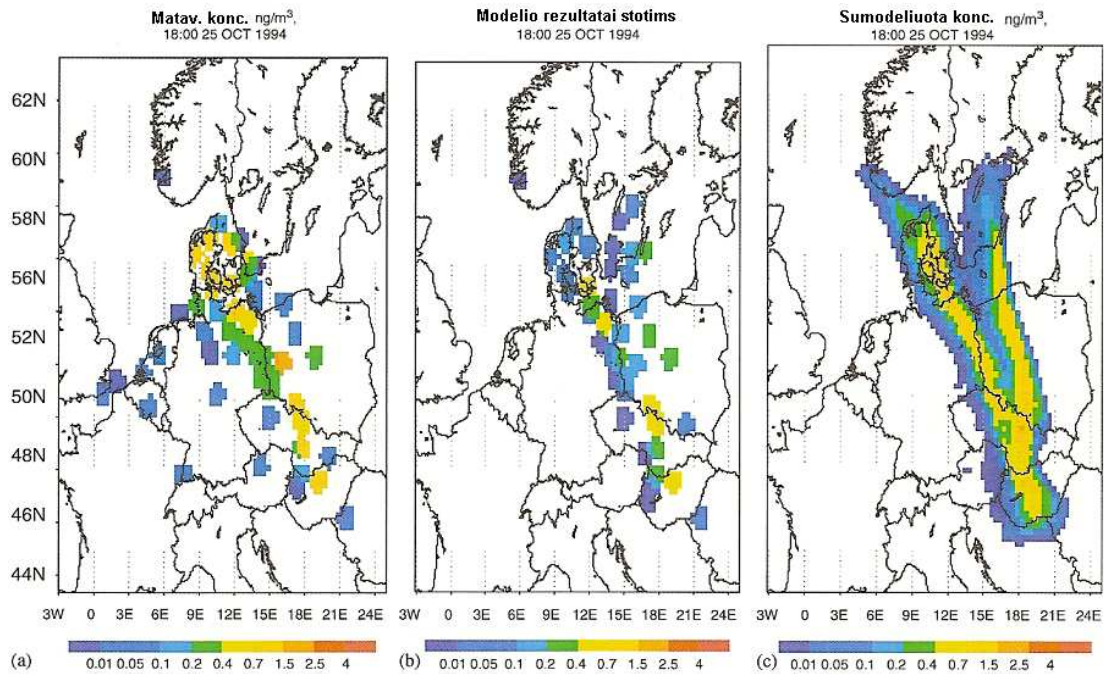
Kiekvienas modelis (nepriklauso nuo tipo) turi būti kažkaip vertinamas. Dažniausias būdas – rezultatų lyginimas su matavimų duomenimis. SILAM modelis buvo įvertintas remiantis ETEX eksperimento duomenimis.

ETEX – Europos ir kai kurių pasaulio institucijų jungtinis eksperimentas, kurio metu į atmosferą buvo paleisti perfluoruoti anglies junginiai (perfluorocarbons) ir sekamas jų judėjimas, matuojant koncentraciją visoje Europoje. Vėliau duomenys naudoti modelių verifikacijai ir kalibravimui.

SILAM modelio patikimumo vertinimui buvo naudoti duomenys iš pirmosios ETEX fazės (1994 m.). Apibendrinti rezultatai nėra idealūs, bet 0,6 koreliacijos koeficientas naudojant 150 matavimo stočių duomenis, yra tikrai aukštas.



2 pav. Išmatuotos stotyse (a), SILAM sumodeliuotos stotims (b) ir SILAM sumodeliuotos teritorijai „pėdsakinių dujų“ koncentracijos 1994-10-24



3 pav. Išmatuotos stotyse (a), SILAM sumodeliuotos stotims (b) ir SILAM sumodeliuotos teritorijai „pėdsakinių dujų“ koncentracijos 1994-10-25.

Pagal 2 ir 3 paveikslėlius, puikiai matoma, kad nors SILAM ne itin tiksliai prognozuoja koncentracijas viename ar kitame taške, bet rezultatuose puikiai pateikia visą teršalų kelią. Kadangi pagrindinė SILAM modelio paskirtis yra modeliuoti avarines situacijas (t.y. įvykus avarijai objekte paleidžiamas modelis su preliminariais duomenimis ir stebima kur sklis teršalai), tai savo paskirtį tokiu tikslumu jis pilnai tenkina, nes būtent tomis aplinkybėmis svarbiau yra trajektorija, o ne koncentracija. Tačiau nagrinėjant kietųjų dalelių pernašą, svarbūs abu parametrai. Todėl, atrodo, kad modelis nebūtų tinkamas įrankis pasirinktam darbui, tačiau tikslumo vertinimas atliktas su sena modelio versija (3.5), o šiuo metu naudojama iš principo pakeista versija (4.01), kurioje net skaičiavimai atliekami nebe Lagranžo, bet Eulerio metodais.

Eksperimento metu skaičiavimai buvo atliekami naudojant tinklėlį, kurio ląstelės plotis ir ilgis po 25 km, todėl atsiranda būtinybė supaprastinti atsitiktinio dalelių judėjimo skaičiavimą, o kaip šio veiksmo pasekmė kyla dvi problemos:

- SILAM modelis pervertina koncentracijos maksimumus t.y. rezultatuose koncentracijos maksimumai „didesni“, nei realybėje.
- Žinant išmestų teršalų kiekį pagal masės tvermės dėsnį, niekas niekur nedingsta, todėl pervertinus maksimumus atsiranda teritorijų su mažesnėmis koncentracijomis nei realybėje – tai kraštinės teritorijos.

Nepaisant šių dviejų problemų (kurios dingsta sutankinus tinklėlį) daugiau rezultatai yra pakankamai geri, kad jai būtų galima remtis kietųjų dalelių pernašos tyrimams modeliavimo pagalba. Be to modelis turi atgalinio veikimo galimybę t.y. pagal pateiktus duomenis, grąžina rezultatus apie taršos šaltinio buvimo vietą. Taip būtų nesunku atsekti, kas yra pagrindinis kietųjų dalelių šaltinis Lietuvoje.

2.2 Darbe naudoti duomenys

Kietųjų dalelių pernašos Lietuvoje modeliavimui būtini tam tikri duomenys. Minimalus jų rinkinys yra meteorologiniai modeliuojamo laikotarpio duomenys ir emisijos kiekiai (pastarieji gali būti įvairiu formatu). Norint tirti „svetimų“ - iš kitų šalių ir regionų atkeliaujančių teršalų pernašos kryptis bei jų kiekius išskrintančius šlapiuoju ir sausuoju būdais, reikalingi ir kitų šalių tokie patys duomenų rinkiniai.

Emisijos duomenys gali būti gaunami ganėtinai laisvu formatu, artimu, o meteorologiniai duomenys turi būti gauti HIRLAM arba ECWMF skaitmeniniais modeliais.

Pažymėtina, kad laike, modelio SILAM veikimas įmanomas tik nuo momento, kai emisijos ir meteorologiniai duomenys persidengia iki taško kol vėl baigiasi abiejų arba

vieno iš duomenų aibės t.y. SILAM modelis gali atlikti modeliavimus tik meteorologinių ir emisijos duomenų aibių sankirtoje.



4 pav. Duomenų aibių ir SILAM modeliui būtino sankirtos grafinis atvaizdavimas.

Erdvėje modelio veikimo apribojimai yra kitokie: modeliuojamas laukas apriojamas meteorologinių duomenų aibės t.y. Kietųjų dalelių (kaip ir kitų medžiagų, kurių sklaidą geba modeliuoti SILAM) taršos ir koncentracijos bei kitų parametrų modeliavimas gali vykti visame lauke, kuriam turimi ir naudojami meteorologiniai duomenys.

Tiksliems rezultatams gauti reikalingi tikslūs ir kuo smulkesnio mastelio Lietuvos kietųjų dalelių emisiją iš ploto vieneto apibūdinantys duomenys bei Europos kietųjų dalelių taršos iš ploto vieneto duomenys (tam, kad įvertinti „svetimų“ („išorinių“) kietųjų dalelių pernašą Lietuvoje). Be to, reikalingi kuo didesnio ploto meteorologiniai duomenys už pakankamai ilgą laikotarpį, kad būtų galima išskirti pastebimas dalelių koncentracijos ir/ar iškritimo pasiskirstymo Lietuvos teritorijoje tendencijas.

Taršos duomenis jau seniai planuota imti iš programai duomenis teikiančios organizacijos. Deja, nei pačių 2005 metais pateiktų duomenų, nei naujesnio jų varianto Lietuvoje negalėjo pateikti nei viena iš organizacijų į kurias buvo kreiptasi (Aplinkos apsaugos agentūra, Fizikos institutas, Aplinkos ministerija). Todėl panaudoti visi prieinami emisijos duomenys ir atlikta eilė veiksmų (aprašytų kitame skyriuje) ir gauti modeliavimui naudoti duomenys.

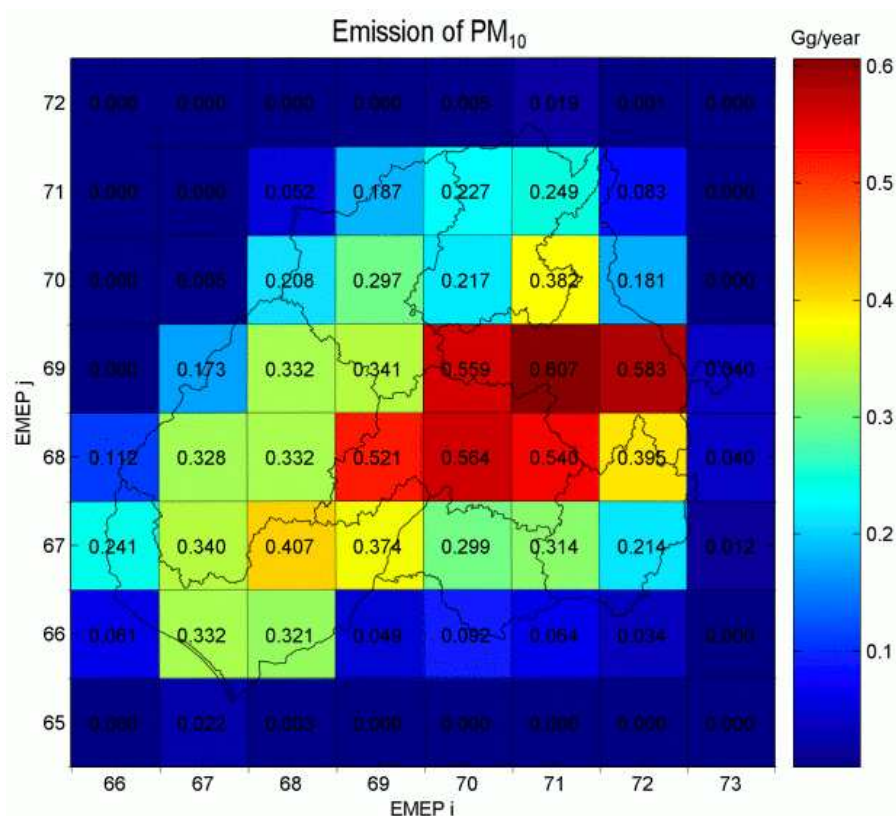
Kiekviena duomenų rūšis naudota darbe aprašyta konkrečiuose šio skyriaus poskyriuose.

2.2.1 Emisijos duomenys

Emisijos duomenys, kaip jau minėta šiame darbe, yra labai svarbūs, tačiau kadangi tikslų duomenų taip ir nebuvo gauta, teko naudoti kitus būdus esamiems ne tokiems tiksliais duomenims patikslinti ir paversti tinkamais naudoti.

Pirmoji problema, su kuria buvo susidurta – itin stambus esamų duomenų mastelis. EMEP duomenys pasiekiami tik 50X50km kvadratais. Deja, tokių duomenų yra per

maža t.y. Jie itin prastai įtakotų rezultatus. Kaip pavyzdį, galime įsivaizduoti kvadratą teoriškai aprėpiantį Vilnių ir Elektrėnus. Tarkime Elektrėnuose sėkmingai visu pajėgumu paleidžiama šiluminė elektrinė ir tai įtraukiama į „stambiuosius“ duomenis. Tuomet minėtas kvadratas „juodija“ nuo teršalų kaip ir jame esantis Vievis, o realiai galbūt yra visiškai maža emisija pasižyminčių smulkesnių kvadratų (kad ir 10kmX10km), bet jiems priskirtas viso didžiulio kvadrato emisijų vidurkis. Tokiu atveju labai smarkiai iškraipomos pradinės modeliavimo sąlygos ir rezultatų vertė yra abejotina. Tačiau reiktų bent 5kmX5km mastelio duomenų. Tačiau yra papildomi Statistikos departamento taršos kietosiomis dalelėmis duomenys pagal savivaldybes (tiek rajonų, tiek ir miestų).



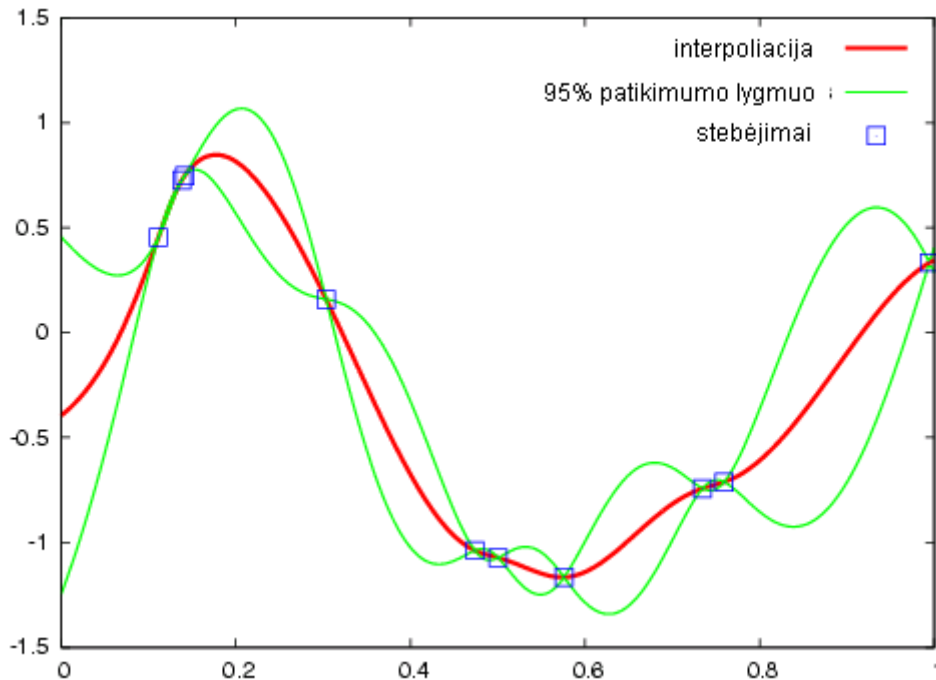
5 pav. Emisijos duomenys 50x50km. (Fizikos institutas, 2005)

Antroji problema – duomenų formatas. SILAM modelio emisijos duomenų įvesties būdas ir taisyklės yra labai specifiniai ir naudojami tik tame viename modelyje. Visų pirma reikia pasirinkti tinkamą būdą aprašyti emisijos duomenis (ar tai taškinis šaltinis, ar teritorija ir t.t.). Šiame darbe (be AB „Mažeikių nafta“ gaisro modeliavimo), emisijai aprašyti naudotas teritorijos (emisijos iš ploto vieneto) būdas.

Pirmosios problemos sprendimas – interpoliacija ir statistinių metodų taikymas interpoliuotų duomenų verifikavimui ir tikslinimui. Kadangi, kaip jau minėta, imti EMEP 50kmX50km kvadratų, bei Statistikos departamento pateikti savivaldybių teritorijų taršos duomenys, nuspręsta tiek vienus tiek kitus interpoliuoti ir apjungti. Interpoliacija atlikta

programine įranga *Golden Software Surfer 8*. Naudotas interpoliacijos metodas – *Kriging*.

Šio interpoliacijos metodo kūrėjas - Pietų Afrikos kalnakasybos inžinierius D.G. Krige. Beje, tai buvo jo magistro darbas. Kriging algoritmo esmė yra sumažinti interpoliavimo klaidų dispersiją, siekiant gauti kuo artimesnę neutraliai (t.y. lygią nuliui) interpoliuotų reikšmių sisteminę paklaidą ir skaičiuoti svertinius koeficientus naudojant paprasčiausias tiesės funkcijas.



6 pav. Tipiškas vienos dimensijos dydžio Kriging interpoliacijos rezultatas. (Emmanuel Vazquez, 2005)

Metodas grindžiamas svartinio koeficiento skaičiavimu naudojant slenkančio vidurkio funkciją (2, 3):

$$\hat{z} = \hat{z}_0 = \sum_{i=1}^n \lambda_i z_i \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \quad (3)$$

\hat{z}_0 - bet kuriame taške su koordinatėmis x_0 ir y_0 ieškomo taško atributo reikšmė;

z_i - reikšmė duomenų taške i , kurio koordinatės x_i ir y_i ;

n - interpoliavimo procese naudojamų duomenų taškų skaičius, $n=1, 2, \dots, n$;

λ_i - svertinis koeficientas.

z reikšmė apskaičiuojama kaip svertinių koeficientų ir juos atitinkančių taškų reikšmių sandaugos suma.

Pagrindinis Kriging metodo bruožas, atskiriantis jį nuo kitų deterministinių interpoliavimo schemų, yra tas, kad svertiniai koeficientai nustatomi iš apskaičiuotos semivariogramos. Todėl pirmiausia, būtina parinkti tinkamus nustatymus tam, kad būtų sukurta maksimaliai teisinga semivariacijos apskaičiavimo seka programinėje įrangoje (šiuo atveju *Golden Software Surfer 8*). Semivariacijai apskaičiuoti naudojamos įvairios funkcijos: sferos, eksponentinė, tiesės, Gausso ir kt. Dažniausiai rekomenduojama sferos lygtis (4, 5):

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 \left\{ \frac{3h}{2h_a} - 0.5 \left(\frac{h}{h_a} \right)^3 \right\}, \quad \text{kai } 0 < h < h_a \quad (4)$$

$$\begin{aligned} &= c_0 + c_1, & \text{kai } h \geq h_a \\ \gamma(0) &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

γ - semivariacija.

Pavyzdžiui, jei c_0 (atsitiktinė pusvariacija) = 40;

c_1 (slenkstis) = 35;

h_a (slenksčio nuotolis) = 180

tai, esant bet kokiam atstumui h tarp 2 taškų, pagal sferos modelį surandama pusvariacija bus:

$$\gamma \text{ esant atitinkamam atstumui } (h) = 40 + 35 \left\{ \frac{3 * h}{2 * 180} - 0.5 \left(\frac{h}{180} \right)^3 \right\} \quad (6)$$

Dažniausiai naudojami trys Kriging variantai:

- Normalusis (*Ordinary Kriging*) apskaičiuoja interpoliuotas reikšmes, naudojant pastovų, bet nežinomą vidurkį, leidžiant didesnę vietinę gretimų reikšmių įtaką. Šis metodas gana lankstus, tačiau neprilygsta kitiems nustatomų parametru skaičiumi.
- Paprastasis (*Simple Kriging*) apskaičiuoja interpoliuotas reikšmes, naudojant pastovų, žinomą vidurkį. Matematiškai paprasčiausias variantas, bet emisijos duomenų interpoliacijai netinkamas, nes būtent dėl pastovaus ir menamai žinomo vidurkio duomenys smarkiai iškraipomi (vietomis emisija neigiama!!!).
- Universalusis (*Universal Kriging*) apskaičiuoja interpoliuotas reikšmes pagal menamo paviršiaus nuolydžio kryptį su nežinomais koeficientais. Metodas nenaudotinas su

emisijos duomenimis, nes emisija menkai tepriklauso nuo menamo paviršiaus nuolydžio krypties ir statumo (t.y. arba fabrikas stovi konkrečio vietoje ir skleidžia teršalus, arba ne, o jei stovi fabrikas dar yra ir aplink esanti infrastruktūra, kuri taip pat teršia, bet jos taršos kiekiai gali visiškai neatitikti fabriko taršos kiekio t.y. nekoreliuoti su fabriko tarša).

Kriging metodu surandamos ir taškų su žinomomis reikšmėmis reikšmės, o tai gali būti naudojama vykdant interpoliavimo įvertinimą.

Kriging metodo praktinis panaudojimas gana sudėtingas. Semivariogramos išlyginimo funkcijos pasirinkimas gali lemti interpoliavimo rezultatus, o kriterijų, kaip geriau ją parinkti, nėra. Paprastai ši operacija atliekama studijuojant pusvariogramas, dažnai naudojant vadinamąjį bandymų-klaidų metodą.

Interpoliuojant Kriging metodu gauti emisijos duomenys buvo patikrinti susumuojant visų taškų emisiją ir lyginant su Aplinkos ministerijos pateiktu oficialia kietųjų dalelių emisijos suma už 2005 metus. Interpoliacijos būdu gautas suminis kietųjų dalelių, kurių aerodinaminis skersmuo yra mažesnis arba lygus 10 mikrometrų, kiekis buvo ~11 gigagramų per metus iš visos Lietuvos Respublikos teritorijos. Tuo tarpu Aplinkos ministerijos pateikiama metinė visos respublikos emisija 2005 metais yra ~10,3 gigagramo. Mažesnė nei 10% kietųjų dalelių emisijos sumos per metus paklaida yra daugiau nei pakankama tam, kad modeliavimo rezultatai būtų priimtini. To priežastys: kietųjų dalelių koncentracijos ore (taip pat ir išmetimų iš judančių objektų) matavimo paklaida gali siekti iki 30% naudojant sorbentus; skaičiuojant ilgesnio laikotarpio (kad būtų kuo daugiau skaičiavimo žingsnių) vidurkį, paklaida pasiskirsto visame plote ir tampa nereikšmingai maža. Tam, kad paklaida kaip galima labiau sumažinti pasirinktas modelio laiko „žingsnis“ - 3 valandos.

Turint interpoliacijos duomenis reikėjo juos paversti į modeliui suprantamą formatą (t.y. į vietinę koordinacių sistemą, tinkamus vienetus ir t.t.). Tai buvo atlikta su iš anksto prieš duomenų gavimą parengtais įrankiais (dauguma jų veikia Microsoft Excel pagrindu). Įrankiams parengti pasinaudota įvairioms analizėms atlikti kuriamų įrankių aprašymais bei autorių (*Walkenbach, 2000; Birnbaum, 2003*) aprašančių išplėstines Microsoft Excel programinės įrangos galimybes, knygomis. Operacijos atliktos tokia tvarka:

- Interpoliuotų duomenų aibė (taškai išdėstyti nekintamo žingsnio tinkleliu su emisijos reikšmėmis) paversta į emisijos iš ploto vieneto aibę (apskaičiuojant atstumus tarp taškų ir konkrečių minėto nekintamo žingsnio tinklelio ląstelių plotus) su vietinėmis koordinatėmis t.y. ilguma ir platumu išreiškiamą ploto vieneto (ląstelės) kairiojo apatinio taško padėtimi tinklelyje.

- Ląstelių duomenys paversti į tinkamą formatą (vietoj X,Y,Z į val = X.0 Y.0 Z.0) įsitikinant, kad nėra defektyvių ląstelių su realybės neatitinkančiais duomenimis (pvz. Peržengtos tinklelio ribos arba emisija neigiama).
- Į tinkamą formatą paversti duomenys įkelti į emisiją aprašantį failą.

Emisiją aprašančiame faile yra ir daugiau svarbių nustatymų:

source_name – laisvai pasirenkamas emisijos teritorijos pavadinimas;

source_sector_name – emisijos sektoriaus pavadinimas (patogu jei teritorijas skaidoma į sektorius, kurie apibūdina konkrečios teritorijos emisiją. Paprastai taikoma, kai modeliuojamos teritorijos dalyse labai skirtingi emisijos parametrai);

grid_type – emisijos duomenų tinklelio tipas. Standartiškai, tai ilgumos platumos tinklelis (lon_lat). Kiti pasirinkimai vartotini itin retais ir ypatingais atvejais;

nx – emisijos duomenų tinklelio ląstelių skaičius su kintančia ilguma (t.y. žiūrint vizualiai žemėlapyje, ląstelių skaičius horizontalėje). Šiame darbe Lietuvos teritorijos emisijos tinklelio ląstelių su kintančia ilguma yra 157;

ny – emisijos duomenų tinklelio ląstelių skaičius su kintančia platumą (t.y. žiūrint žemėlapyje – ląstelių skaičius vertikalėje). Šiame darbe Lietuvos teritorijos emisijos tinklelio ląstelių su kintančia platumą yra 37;

lat_start – emisijos duomenų tinklelio apatinio kairiojo taško platumą (šiuo darbe Lietuvos emisijos atveju platumą yra N 53,81666);

lon_start – emisijos duomenų tinklelio apatinio kairiojo taško ilgumą (šiuo darbe Lietuvos emisijos atveju platumą yra E 19,71666);

dx – emisijos tinklelio ilgumos žingsnis (laipsniais). Šiame darbe naudotas žingsnis 0,0444 laipsnio;

dy – emisijos tinklelio platumos žingsnis (laipsniais). Šiame darbe naudotas žingsnis 0.0782 laipsnio;

lat_s_pole, lon_s_pole - naudojamos koordinatų sistemos pietų poliaus padėtis (keičiant šį parametą galima orientuoti žemėlapi atvaizdavime kaip norima, be to šį parametą reiktų derinti su meteorologiniais duomenimis (t.y. kad šis paramteras meteorologiniuose duomenyse ir šiuose emisijos nustatymuose sutaptų); **lat_pole_stretch, lon_pole_stretch** – taip pat koordinatų sistemos parametrai leidžiantys keisti išvesties vaizdą. Atliekant šį darba jokios koordinatų sistemos transformacijos neatliktos;

release_rate_unit – emisijai per laiko vienetą aprašyti naudojami matavimo vienetai (priimtini emisijos kiekio matavimo vienetai:kg, g, tona, bq, moliai, dalelių skaičius, o laiko vienetai:metai, mėnesiai, dienos, valandos, minutės, sekundės). Paprastai naudojama kg per metus (nes dažniausiai būtent tokiais dydžiais pateikiami nacionaliniai duomenys). Atliekant šį darbą pasirinkta paprastumo dėlei rinktis ne standartinius SI sistemos mato vienetus (gramai per sekundę), o jau minėtą variantą – kilogramai per metus;

vertical_distribution – vertikalus emisijos pasiskirstymas. Paprastai naudojami nustatymai, kad emisija pakliūna į viena nurodyto aukščio ir storio atmosferos sluoksnį, bet esant sudėtingesnėms sąlygoms, galima nurodyti net kelis sluoksnius, kuriuose teršalai padalinami proporcijomis (tarkim 0-50m sluoksnyje pasklinda 80% emisijos, o likę 20% pasklinda sluoksnyje 50-100m). Atliekant šį darbą buvo laikoma, kad sluoksnis yra vienas ir jo storis yra 400m nuo paviršiaus;

vertical_unit – vertikalaus teršalų pasiskirstymo sluoksnio aukščio ir storio matas.

vert_level - aprašo vertikalaus pasiskirstymo sluoksnį, jei nurodyta, kad teršalai patenka ne į vieną, o kelis sluoksnius. Šis nustatymas leidžia aprašyti vertikalaus pasiskirstymo sluoksnio aukštį, storį, teršalų pakliūnančių į šį sluoksnį proporciją. Beje, aukštį galima nurodyti tiek metais, tiek ir hpa. Taip pat yra konstantos leidžiančios parinkti jau aprašytus sluoksnius: PRESSURE – nurodytą slėgį atitinkantis sluoksnis, HEIGHT_FROM_SURF – nurodytą aukštį nuo paviršiaus atitinkantis sluoksnis, ALTITUDE_FROM_SEA – nurodytą aukštį nuo jūros lygio atitinkantis sluoksnis, HYBRID – mišrus sluoksnis, SURFACE_LEVEL – paviršiaus sluoksnis, TOP_ATMOSPHERE_LEVEL – viršutinis atmosferos sluoksnis, MEAN_SEA_LEVEL – vidutinį jūros lygį atitinkantis sluoksnis, ENTIRE_ATMOSPHERE_LAYER – visa atmosferos storumė;

cocktail_composition – teršalų sudėtį leidžiantis pasirinkti parametras. Jei pasirenkamas nustatymas COMMON, tai naudojamas pasirinkta teršalų rūšis visoms ląstelėms, jei SPECIFIC, tai kiekvienai ląstelei teršalų rūšis apibūdinama individualiai. Atliekant šį darbą pasirinktas variantas COMMON t.y. visose ląstelėse teršalai vienodi – kietosios dalelės;

emitted_substance – išmestų teršalų dalis (kadangi teršalų rūšys gali būti skaidomos dar ir į teršalų dalis (pvz. Kietosios dalelės į frakcija pagal

stambumą), tai pasirenkama konkreti arba visos frakcijos (šio darbo atveju pasirinktos visos frakcijos įeinančios į KD10 sudėtis t.y. 0,1 – 2,5 bei 2,5 – 10 mikrometrų aerodinaminio skersmens dalelės. Atliekant šį darbą laikoma, kad išmetamas visas kietųjų dalelių spektras;

par_str – tokio parametro eilučių gali būti daug. Šios eilutės aprašo kaip emisija pasiskirsto laike (bandomajame modeliavime su AB „Mažeikių nafta“ gaisru, šis parametras labai pagelbėjo, nes gaisras išsismarkavo neiškart, todėl būtent šio parametro dėka buvo galima nurodyti periodus su skirtingais emisijos tempais). Šiame parametre taip pat aprašoma medžiaga, kuri išmetama t.y. teršalai. Šiam darbui parinktu laikotarpiu emisija buvo tolygi visą periodą;

hour_in_day_index – šio parametro dėka galima nurodyti emisijos kaitą priklausančią nuo paros meto (patogu, kai pagrindinis emisijos šaltinis transportas – galima nurodyti piko valandas). Šiame darbe laikoma, kad emisija visą parą tolygi;

day_in_week_index – šiuo parametru aprašoma emisijos tempo kaita savaitės dienomis. Atliekant šį darbą laikyta, kad emisija visuomet vienoda;= 1. 1. 1. 1. 1. 1. 1.

month_in_year_index – šis parametras aprašo emisijos tempo kaitą atskirais metų mėnesiais. Kaip jau minėta, šio darbo atveju rinktasi, kad emisija visuomet vienoda; **val = 0. 10. 1.901** – tai pavyzdinė, emisiją iš ląstelės, aprašanti eilutė. Pirmasis parametras yra vietinė x koordinatė (atitinka ilgumą); antrasis parametras vietinė y koordinatė (atitinka platumą), o trečiasis parametras – emisija pasirinktai vienetais per pasirinktą laiko tarpą iš nurodytos ląstelės. Pažymėtina, kad tokių ląstelių šiame darbe aprašant Lietuvos emisija yra ~5000. Taip pat pažymėtina, kad ląstelių padėties vietinė koordinatė yra realusis skaičius t.y. galima nurodyti emisiją ir viduryje ląstelės ir šone t.y. ten kur reikia. Labai patogi savybė panaudota šiame darbe yra tai, kad nebūtia nurodyti emisiją iš visų emisijos tinklelio ląstelių tokiu atveju nereikia įtraukti aplinkinių šalių teritorijų dalies emisijos ir galima atrinkti tik norimą teritoriją.

Pagrindiniuose nustatymuose yra parametras nurodantis kiek per modeliuojamą laikotarpį bus „paleista“ dalelių. Tokiu atveju padalinus šį skaičių iš laikotarpio laiko žingsnių skaičiaus gaunama kiek dalelių išmetama į orą su kiekvienu laiko žingsniu. Iš šio skaičiaus padalinus visos emisijos sumą gaunama kokią teršalų masės dalį atitinka viena dalelė. Šio darbo atveju dalelių skaičius nurodytas 800000 per kiekvienus du mėnesius. Tokiu atveju modelis vienai dalelei priskiria ~110g teršalų. Vienavertus, kai koncentracija matuojama

mikrogramais kubiniame metre toks dydis atrodo galintis duoti netikslius rezultatus, tačiau modeliuojant ilguoju laikotarpiu ir vidurkinant rezultatai pakankamai tikslūs (standartiniuose prie modelio pateikiamuose nustatymuose naudojamas būtent toks dydis). Be to didinant dalelių skaičių, skaičiavimų skaičius (ir tuo pačiu laikas) didėja eksponentės funkcijos tempais.

2.2.2 Meteorologiniai duomenys

Su meteorologiniais duomenimis situacija yra kiek kitokia – duomenų yra, jie tikslūs, mastelis smulkus, bet jie nėra apimantys bent vienus pilnus metus t.y. yra periodų kuomet HIRLAM skaitmeninio orų prognozės modelio rezultatų nėra. Modelio teritorinė aprėptis yra sąlyginai nedidelė t.y. ne visa Europa (žr.1 lentelė).

1 lentelė. Meteorologinių duomenų tinklelis.

	Ilguma	Platuma
Pietvakarinis dengiamos teritorijos taškas	15°	51°
Šiaurritinis dengiamos teritorijos taškas	33°	61°
Lastelės dydis	0,08°	0,08°

Pagrindinė problema susijusi su meteorologiniais duomenimis – jų apimtis. Apytikslis vieno mėnesio nurodytos teritorijos duomenų kiekis yra ~100GB. Palyginimui verta paminėti, kad šiuolaikinio kompiuterio kietasis diskas ~160GB. Vieno mėnesio duomenų siuntimas standartine interneto linija užtruktų ~3 mėnesius. Todėl buvo būtina naudotis išorinėmis laikmenomis ir pasirinkti minimalų duomenų rinkinį bei trumpinti skaičiavimų laikotarpį.

Naudojamų meteorologinių duomenų rinkinys (jei nenurodytas aukštis ar/ir lygis, tuomet meteorologinis dydis turi ~60 vertikalių lygių):

- Slėgis jūros lygyje (Pa)
- Sukauptas didelio masto lietaus kiekis (kg/m²)
- Sukauptas „konvekcinis“ lietus (kg/m²)
- U vėjo komponentė 10m aukštyje (m/s)
- V vėjo komponentė 10m aukštyje (m/s)
- Temperatūra 2m aukštyje (K)
- Absoliutinė drėgmė 2m aukštyje (kg/kg)

- U vėjo komponentė (m/s)
- V vėjo komponentė (m/s)
- Temperatūra (K)
- Absoliutinė drėgmė (kg/kg)
- W vėjo komponentė (Pa/s)
- Vidutinis slėgis jūros lygyje (Pa)

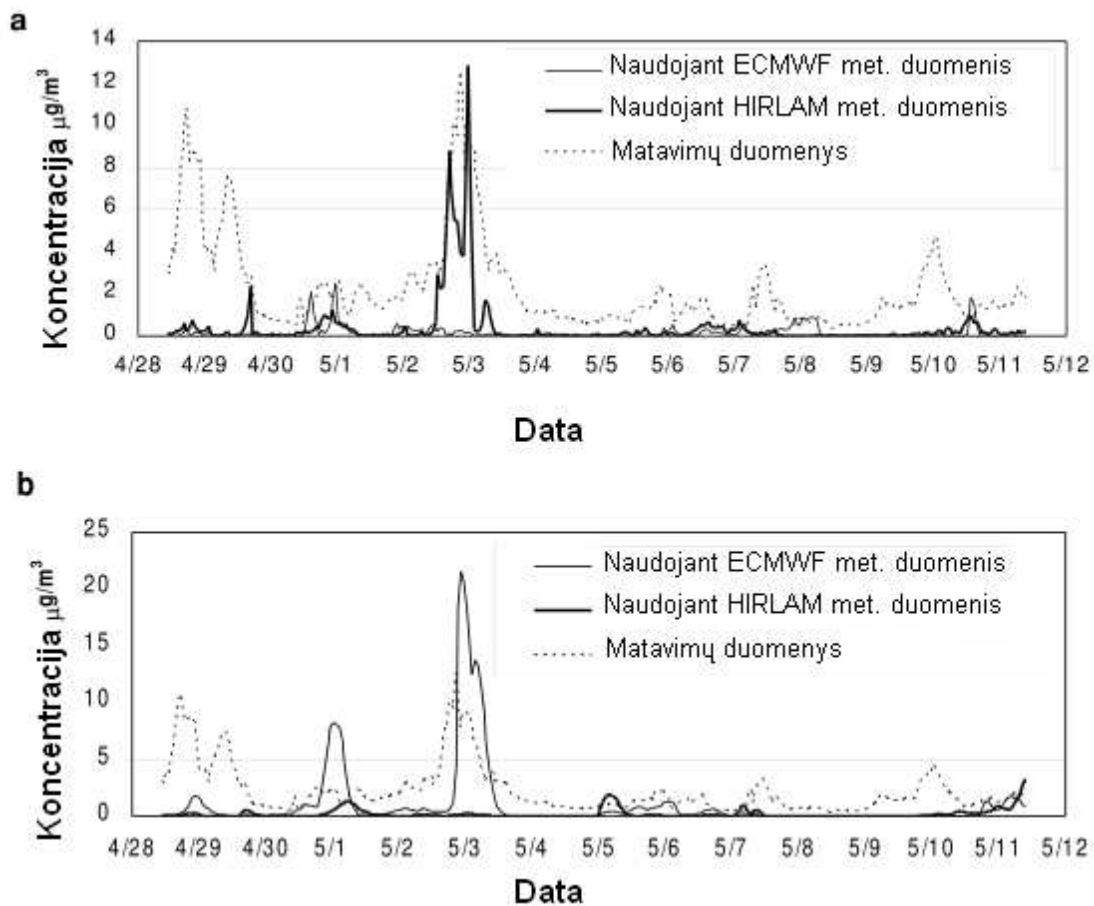
SILAM modelis pajėgus atlikti modeliavimą ir su ECMWF skaitmeninio modelio duomenimis. Deja, jų pasiekiamumas ir duomenų kiekis (beveik analogiškas HIRLAM duomenų kiekiui) riboja jų panaudojimo galimybes. Egzistuoja ir nedidelis rezultatų skirtumas naudojant skirtingų skaitmeninių modelių duomenis.

Remiantis 2003 metų balandžio – gegužės mėnesių duomenimis Suomijos meteorologijos institute atliktas eksperimentas su skirtingų skaitmeninių modelių meteorologinių panaudojimu modeliuojant kietųjų dalelių pernašą *Värriö* atmosferos matavimo stotyje (Laplandijos regionas, Suomija) (Kaasik M., Prank M., Sofiev M., 2007). Minėto laikotarpio atmosferos užterštumo matavime duomenyse pastebėti kietųjų dalelių koncentracijos pikai. Pritaikius SILAM modelį veikti atvirkštiniu režimu paaiškėjo, kad labiausiai tikėtinas taršos šaltinis yra vienas iš Rusijos metalurgijos fabrikų. Tuomet SILAM modelis paleistas normaliu režimu su HIRLAM ir ECMWF skaitmeninių modelių meteorologiniais duomenimis. Buvo bandytos ir skirtingos SILAM modelio versijos:

- 3.7 versija paremta Lagranžo metodu. (Ši versija itin nuodugniai išbandyta ir pataisyta dauguma netikslumų);
- 4.0 versija paremta Eulerio metodu. (Tai bandomoji versija, kurios dauguma komponentų yra bandomi).

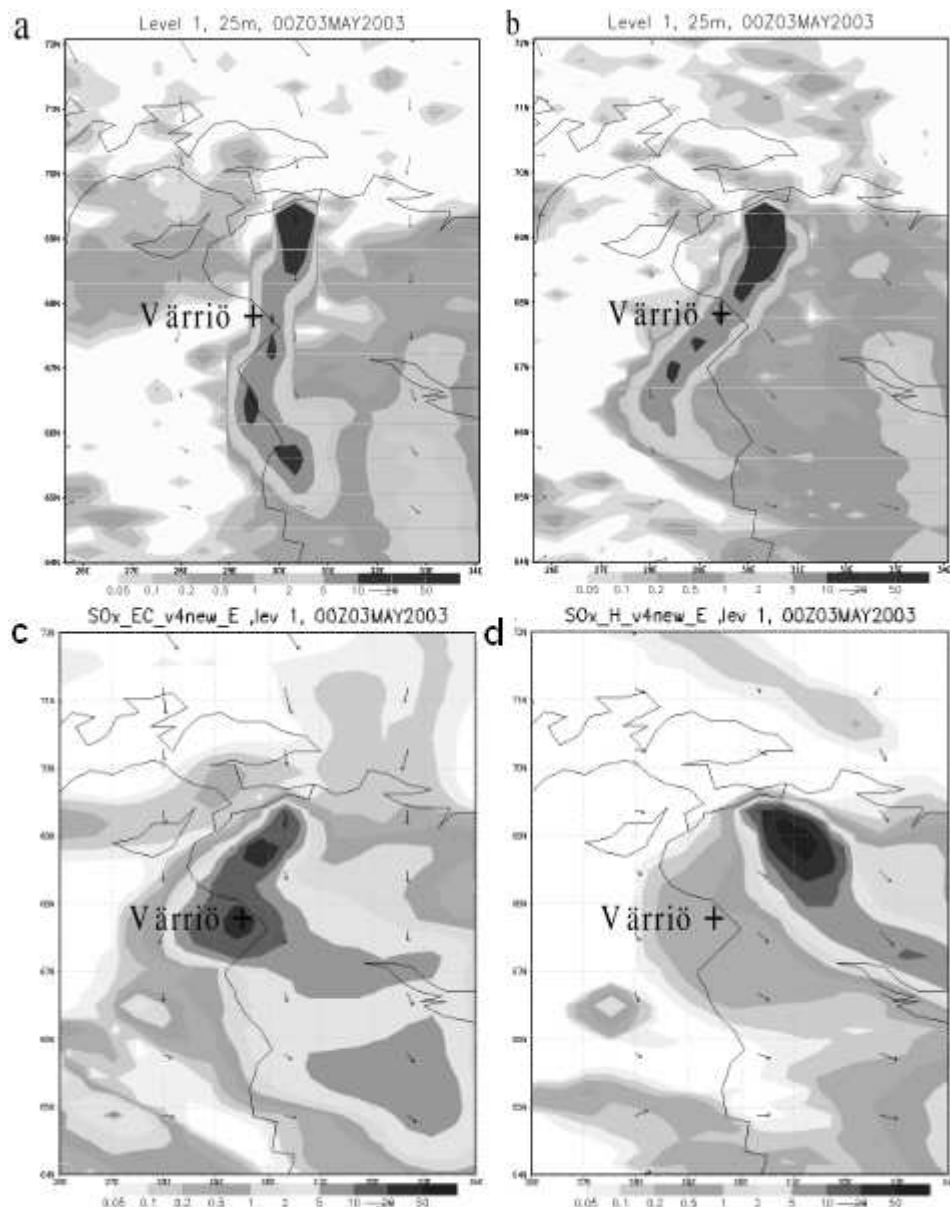
Visų versijų ir skirtingų modelių meteorologinių modelių rezultatai (Kaasik M., Prank M., Sofiev M., 2007) (7 pav.):

- Lagranžo metodą naudojanti versija ir ECMWF skaitmeninio modelio meteorologiniai duomenys – teršalų debesis „nekliudė“ oro kokybės matavimo stotelės.
- Lagranžo metodą naudojanti versija ir HIRLAM skaitmeninio modelio meteorologiniai duomenys – teršalų debesis „kliudė“ oro kokybės matavimo stotelę.
- Eulerio metodą naudojanti versija ir ECMWF skaitmeninio modelio meteorologiniai duomenys – teršalų debesis „kliudė“ oro kokybės matavimo stotelę.
- Eulerio metodą naudojanti versija ir HIRLAM skaitmeninio modelio meteorologiniai duomenys – teršalų debesis „nekliudė“ oro kokybės matavimo stotelę.



7 pav. Kietųjų dalelių (sulfatų) koncentracija paviršiuje Värriö oro taršos matavimo stotyje: a) modeliavimo SILAM modelio 3.7 versija ir matavimų rezultatai; b) modeliavimo SILAM modelio 4.0 versija ir matavimų rezultatai (Kaasik, Prank, Sofiev, 2007).

Šio eksperimento rezultatai parodo, kad modeliavimo rezultatai (8 pav.) nedaug priklauso nuo meteorologinių duomenų šaltinio ir nuo modelio versijos, o tai paranku šiam darbui, nes iki šiol buvo formuojama nuomonė, kad ECMWF skaitmeninio modelio duomenys yra tikslesni ir geresni (nes pats modelis pripažįstamas ir naudojamas daugelyje Europos institucijų) teršalų sklaidos modeliavimui, o HIRLAM modelis buvo skaitomas eksperimentiniu ir neišbaigtu (ypač dažnai kritikuojamas dėl savo hidrostatiškumo). Be to, tai atskleidžia vieno iš darbo uždavinių (operatyvaus SILAM modelio darbo) būsimų rezultatų tikėtiną tikslumą, kuris dėl HIRLAM skaitmeninio modelio meteorologinių duomenų naudojimo, iš anksto buvo vertinamas prastai.



8 pav. Kietųjų dalelių (sulfatų) koncentracija paviršiuje (laikas: 2003 metų gegužės mėn. 3d. 0:00): a) modeliavimo SILAM modelio 3.7 versija naudojant ECMWF skaitmeninio modelio meteorologinius duomenis rezultatai; b) modeliavimo SILAM modelio 3.7 versija naudojant HIRLAM skaitmeninio modelio meteorologinius duomenis rezultatai; c) modeliavimo SILAM modelio 4.0 versija naudojant ECMWF skaitmeninio modelio meteorologinius duomenis rezultatai; d) modeliavimo SILAM modelio 4.0 versija naudojant HIRLAM skaitmeninio modelio meteorologinius duomenis rezultatai. (Kaasik, Prank, Sofiev, 2007).

2.3 Bendrieji modelio nustatymai

SILAM modelis neturi jokios grafinės vartotojo sąsajos (t.y. jokio valdymo pele, patogių mygtukų ir slankiklių), todėl visi nustatymai tiesiog aprašomi failuose. Vienas iš

pagrindinių nustatymų aprašymo failų yra vadinamasis „control“ failas. Visi nustatymai čia suskirstyti į tipus.

Bendrieji nustatymai:

- **case_name** – modeliavimo (*angl. Model run*) identifikatorius. Paprastai kiekvienam modelio paleidimui reikalingas skirtingas identifikatorius, nes nuo identifikatoriaus priklauso fizinė vieta diske, kur bus rašomi rezultatai, todėl palikus tą patį identifikatorių rezultatai rašomi ant jau esančių viršaus ir taip prarandami pirmieji rezultatai.
- **system_setup** – smulkesnių sisteminių parametrų aprašymo failo nurodymas (smulkesnieji nustatymai yra labai specifiniai, todėl jų keisti šio darbo metu neprireikė).
- **direction_in_time** – modelio veikimo režimas laiko atžvilgiu. Šis parametras lemia modelio skaičiavimus laiku pirmyn arba atgal. Skaičiavimas atgal naudingas kuomet norima atsekti teršalų šaltinį. Šiam darbui atlikti atgalinio režimo neprireikė.
- **start_time** – modelio skaičiavimų pradžios laikas. Klaidingus rezultatus dažnai įtakoja netinkamai nurodytas pradžios laikas. Būtina nurodyti vienu žingsniu ankstesni laiką, negu norimų rezultatų pradžios momentas. Taip yra dėl to, kad pradiniu laiko momentu (iki sekančio laiko žingsnio) visi parametrai „auga“ t.y. pradiniu momentu absoliučiai visi dydžiai yra neapibrėžti.
- **computed_period** – skaičiavimo periodo trukmė. Paprastai taip pat verta nurodyti vienu žingsniu ilgesnį periodą, rezultatų tikslumo vardan.
- **time_step** – skaičiavimų laiko žingsnis.
- **nbr_of_particles** – šis parametras labai svarbus skaičiavimų tikslumui ir kiekiui t.y. modeliavimo trukmei. Kuo daugiau dalelių – tuo tiksliau, tačiau tuo daugiau techninių resursų naudojama. Šis parametras aprašytas prie emisijos duomenų. Darbe naudotas įvairus dalelių skaičius, tačiau optimaliausias tikslumo ir techninių reikalavimų atžvilgiu yra ~600000 dalelių.
- **nbr_of_out_trajectories** – šis parametras naudingas norint stebėti dalelių judėjimo trajektorijas. Kadangi šiam darbui dalelių trajektorijos nebuvo reikalingos, tai trajektorijų duomenys nebuvo skaičiuojami.

Dispersijos nustatymai:

- **advection_type** – advekcijos skaičiavimo metodas. Galima rinktis iš Eulerio ir Lagranžo lygtis naudojančių metodų. Šiam darbui atlikti pasirinktas Eulerio lygtis naudojantis metodas. Šis metodas spartesnis (bet reikalaujantis daugiau kompiuterio resursų).
- **grid_method** – dispersijos skaičiavimams naudojamas tinklelis. Šiam darbui pasirinktas meteorologinius duomenis atitinkantis tinklelis, todėl dispersija skaičiuojama visame plote, kuri aprėpia meteorologiniai duomenys, bet galima rinktis emisijos duomenis atitinkantį tinklelį, arba išvesties tinklelį. Galima aprašyti ir savo dispersijos tinklelį (toku pačiu būdu kaip aprašomas emisijos duomenų tinklelis).
- **vertical_method** – vertikalių sluoksnių aprašymas. Šio darbo metu pasirinkti tie patys sluoksniai kokie taikomi ir išvesties duomenims, tačiau galima rinktis ir meteorologinių duomenų vertikalius sluoksnius ir aprašyti savo.

Meteorologinių duomenų nustatymai:

- **dynamic_meteo_file** – meteorologinių duomenų failų vietą nurodantis šablonas susietas su laiku t.y. skirtingi failai ir katalogai naudojami priklausomai nuo modeliuojamo laiko.
- **static_meteo_file** – šiuo parametru nurodomas konkretus meteorologinių duomenų failas, tačiau šiame darbe dėl itin gausaus duomenų kiekio naudotas dinaminė (aprašoma šablonais) meteorologinių duomenų failų paieška.
- **meteo_time_step** – meteorologinių duomenų laiko žingsnelis. Šį parametą būtina nurodyti ir reikia žinoti prieš paleidžiant modelį. Viena dažniausių klaidų ir yra šio parametro netikslus nurodymas.
- **abl_parameterization_method** – atmosferos paribio sluoksnio parametrizacijos schemas parinkimas. Šiame darbe naudotas pilnos parametrizacijos metodas, bet galima rinktis ir „sausąjį“ parametrizacijos metodą.

Cheminiai ir fizikiniai teršalų parametrai:

- **particle_scavenging_type** – dalelių išplovimo tipo aprašymas. Šiam darbui pasirinktas standartinis dalelių išplovimo tipas, bet įmanoma rinktis Chamberlain išplovimo tipą, kuris pranašesnis, bet naudotoje modelio versijoje nėra iki galo realizuotas.

- **particle_dry_deposition_method** – dalelių „sausosios iškritimo“ (nusėdimo) metodas. Šiam darbui atlikti pasirinktas gravitacinis ir paprastosios difuzijos metodas, bet galima rinktis ir paprastąjį, ir pilnąjį ir tik gravitacinį arba tik difuzinį nusėdimo tipą.

Išvesties parametrai:

- **output_time_step** – išvesties laiko žingsnis. Optimaliausias variantas čia yra 3 valandos t.y. kad išvedami duomenys būtų kas tris valandas modeliuojamame laiko tarpe.
- **time_split** – šiuo parametru galima nurodyti kas kiek laiko žingsnių išvestį reiktų perkelti į kitą bylą. Jei aplinkybės (turimi techniniai resursai, operacinė sistema) leidžia – geriausia viską išvestinėti į vieną failą. Tokiu atveju vėliau nebereikia jų apjunginėti skaičiuojant vidurkius ir t.t.
- **file_types** – išvesties tipas (formatas). Šio darbo atveju pasirinktas išvesties tipas GRADS, nes būtent Grads paketas naudojamas duomenų vizualizacijai ir analizei.
- **template** - išvesties fizinės įrašymo vietos šablonas.
- **variable_list** – nurodomas išvesties kintamųjų sąrašas. Šiame darbe pasirinkta į išvestį įtraukti meteorologinius, išvestinius bei emisijos dydžius:
 1. Ričardsono skaičius (išvestinis dydis);
 2. Išplovimo koeficientas (išvestinis dydis), [1/s];
 3. Turbulencijos koeficientas (išvestinis dydis), Kz;
 4. Sukauptas didelio masto lietaus kiekis, [kg/m2s];
 5. „Konvekcinių“ lietaus intensyvumas, [kg/m2s];
 6. Temperatūra 2m aukštyje, [K];
 7. U vėjo komponentė 10m aukštyje, [m/s];
 8. V vėjo komponentė 10m aukštyje, [m/s];
 9. Atmosferos paribio sluoksnio aukštis nuo žemės paviršiaus, [m];
 10. Vidutinis jūros lygio slėgis, [Pa];
 11. Monin-Obukhov ilgis, [m];
 12. Trinties kintamumas, [m/s];
 13. Konvekcijos kintamumas, [m/s];
 14. Turbulentinė temperatūra, [K];
 15. Fiziografija;
 16. Kietųjų dalelių koncentracija ore, [$\mu\text{g}/\text{m}^3$];
 17. Kietųjų dalelių „sausasis iškritimas“ (nusėdimas), [$\mu\text{g}/\text{m}^2$];

18. Kietųjų dalelių išplovimas, [$\mu\text{g}/\text{m}^2$].

- **grid_method** – išvesties tinklėlis (tikslūs parametrai - 2 lentelė).

2 lentelė. Išvesties duomenų tinklėlis.

	Ilguma	Platuma
Pietvakarinis dengiamos teritorijos taškas	19°	52°
Šiaurritinis dengiamos teritorijos taškas	28,53°	57,547°
Ląstelės dydis	0,044944°	0,078947°

2.4 Gaisro AB „Mažeikių nafta“ (2006-10-12) modeliavimas

Po informacijos apie modelį ir procesus lemiančius dalelių pernašą, bei jų parametrizavimą rinkimo buvo bandoma paleisti modelį su kartu pateiktais bandomaisiais duomenimis (avarija Černobylio AE). Susisiekiama su modelio kūrėju bei SILAM modelį tobulinančiais asmenimis ir bendromis jėgomis modelis buvo paleistas, todėl atsirado reali galimybė išbandyti jį ne tik su kartu su modeliu pateikiamais bandomaisiais duomenimis.

Iš įvairių šaltinių (spauda, Aplinkos apsaugos agentūros prie Aplinkos ministerijos ataskaitos) suradus kiek įmanoma daugiau informacijos apie 2006 m. spalio mėn. 12 d. AB „Mažeikių nafta“ teritorijoje įvykusį gaisrą duomenys paversti į modeliui tinkamą formatą, iš Suomijos meteorologijos instituto archyvo paimti tos datos meteorologiniai duomenys ir buvo paleistas modelis. Naudojami duomenys 3 lentelėje, o gauti rezultatai 1 priede.

3 lentelė. AB „Mažeikių nafta“ gaisro simuliacijai naudoti duomenys.

Duomuo	Skaitinė vertė
Ilguma	E 22.18
Platuma	N 56.39
Emisijos taško aukštis	1 m
Teršalai kilo iki	500 m
Teršalų tipas ir kiekis	Kietosios dalelės - ~1 kg/s

Pagal gautus rezultatus puikiai matomas neatitikimas su skelbtais duomenimis. Per visuomenės informavimo priemones buvo skelbiama, kad teršalai pajudėjo Latvijos link ir sparčiai išsisklaidė nesukeldami pavojaus gyventojams. Be abejo toks neatitikimas, galimas dėl netikslių duomenų modeliuojant situaciją, bet pagal surinktus duomenis gauti rezultatai rodo, kad teršalai pajudėjo pietvakarių link, o nedidelė dalelė net pietryčių link. Teršalų debesies centre koncentracija buvo artima 20 mikrogramų kubiniame metre oro, pridėjus foninę vertę, gaunama artima maksimaliai leistinai koncentracijai vertė t.y. 45 mikrogramai kubiniame metre (maksimali leistina – 50 mikrogramų kubiniame metre). Apie vidurnaktį (2006-10-13 00:00) kietųjų dalelių koncentracija teršalų debesyje jau buvo gerokai mažesnė ir pats debesis buvo gerokai nuneštas.

Šis bandomasis modeliavimas buvo lyginamas su Preiloje veikiančios oro kokybės matavimo stotelės duomenimis. Stotelė neužfiksavo jokio kietųjų dalelių koncentracijos ore padidėjimo. Antravertus, kaip toliau šiame darbe aprašoma, bandyta verifikuoti ir ilgesnio laikotarpio modeliavimo rezultatus, bet neatitikimas toks milžiniškas, kad akivaizdu, jog stotelė tuo metu teikė klaidingus duomenis, todėl sunku nuspręsti kiek šis konkretus gaisro modeliavimas atitiko realybę.

Pagal savo mastą avarija negali prilygti netoli Londono degusiai kuro bazei, bet 113 kubinių metrų naftos produktų buvo gana, kad kietųjų dalelių koncentracija priartėtų prie ribinės vertės.

2.5 Modelio veiklos ataskaitos

Pradėjus patį modeliavimo procesą, su jau aprašytais nustatymais ir duomenimis, modelis ekrane spausdina kiekvieną veikimo žingsnį. Pateikiamos klaidos, įspėjimai, skaičiavimų trukmė, bendroji informacija apie modeliuojamus procesus. Orientuojantis į tikslius rezultatus šią informaciją būtina peržvelgti, nes būna atveju, kuomet dėl meteorologinių duomenų nebuvimo naudojami prognozių duomenys (kurie fiziškai paprastai būna kartu su meteorologiniais duomenimis). Tuomet skaičiavimai tampa nebe tokie tikslūs. Be to reiktų stebėti kai, kuriuos rodiklius (pvz. Dalelių skaičiaus įvairiuose modeliavimo segmentuose dinamika), kurie gali įspėti apie įmanoma nesėkmingą modelio darbą t.y. trūkį. Tokiu atveju neprarandant laiko galima iškart priverstinai stabdyti modeliavimą ir atlikus reikiamus pakeitimus paleisti modelį pakartotinai.

Labai naudinga duomenų dalis yra jau minėta dalelių judėjimo dinamika. Tai statistiniai duomenys, kurie rodo kiek dalelių dar laukia išmetimo į atmosferą, kiek jau išmesta, kiek iškeliavo už skaičiavimo teritorijos ribų ir t.t. Paprastai yra nurodoma ir kokią teršalų masę atitinka viena dalelė, todėl galima apskaičiuoti visos modeliuojamos teritorijos

teršalų judėjimo bendrąją statistiką. Paprastai, norint tokius duomenis išgauti iš rezultatų reikia atlikti nemažai duomenų transformacijų.

Vieno iš bandomųjų modeliavimų dalelių judėjimo statistika pateikiama 4 lentelėje.

4 lentelė. Bandomojo modeliavimo dalelių judėjimo statistika.

Modelio laiko žingsnis	Dalelių skaičius ore	Nejudančių dalelių skaičius	Neapibrėžtos būklės dalelės	Viso dalelių
0	0	199999	1	200000
1	0	199999	1	200000
2	6244	193755	1	200000
3	18696	181208	96	200000
4	30014	168677	1309	200000
5	38080	156224	5696	200000
6	41320	143774	14906	200000
7	40510	131234	28256	200000
8	40193	118723	41084	200000
9	42391	106251	51358	200000
10	46334	93750	59916	200000
11	50498	81207	68295	200000
12	54368	68744	76888	200000
13	58991	56266	84743	200000
14	61013	43732	95255	200000
15	65838	31219	102943	200000
16	74021	18716	107263	200000
17	79850	6220	113930	200000

5 lentelė. Į masę paverstų dalelių judėjimo statistika.

Modelio laiko žingsnis	Teršalų masė ore (kg)	Nusėdusių teršalų masė (kg)	Išplautų teršalų masė (kg)	Už skaičiavimo ploto ribų užėjusi teršalų masė (kg)	Nejudančių teršalų masė (kg)	Viso teršalų (kg)
0	0	0	0	0	61670	61670
1	0	0	0	0	61670	61670
2	1689.3	186.61	46.152	0	59743	61665
3	4619.6	699.74	436.79	28.252	55871	61655
4	6960.9	1408.6	933.99	337.35	52004	61645
5	9546.3	1681.8	934.37	1310.2	48161	61634
6	10595	1921.9	1516.4	3271.8	44319	61624
7	10761	2439.0	1583.4	6380.3	40449	61613
8	10574	33336	1585.7	9520.8	36588	61602
9	10712	44151	1585.7	12140	32739	61592
10	11392	54669	1585.7	14255	28882	61582
11	12165	65057	1585.7	16304	25011	61571
12	12072	75076	2441.2	18375	21165	61561
13	11004	81997	4801.2	20236	17314	61554
14	6519	88764	10140	22568	13456	61559
15	3737	95194	15004	23696	9606.6	61563
16	4285.2	10024	17438	24057	5760.5	61565
17	7119.8	10494	17661	24375	1914.7	61565

Panagrinėjus šias lenteles matomi modeliavimo metu vykstantys procesai ir jų mastai. Iškart į akis krenta, kad vos prasidėjus modeliavimui viena dalelė jau yra laikoma neapibrėžtos būklės. Kadangi ši klaida neištaisoma jokiais nustatymais ir matomai tiesiog yra modelio kūrėjų netikslumas (pvz. Įmanoma priežastis dalelių numeracija nuo nulio), nuspręsta į ją tiesiog nekreipti dėmesio, juolab kad esant pakankamam dalelių skaičiui ši klaida nesukeltų pastebimos paklaidos. Kita taip pat iškart pastebima klaida visos teršalų masės kitimas. Šis dydis kisti neturėtų, nes aprėpiamos visos teršalų būklės (už skaičiavimo ploto ribų, ore, išplauta/nusėdę ir t.t.), bet šiek tiek kinta. Praktikoje pastebėta, kad modelio

rezultatams tai įtakos neturi, nes paprastai šį kitimą lemia įvairūs atminties valdymo procesai bei anomalijų atvejų aptikimas (pvz. Dalelė taip sparčiai kilo, kad per keletą modelio laiko žingsnių atsidūrė už atmosferos ribų), tačiau jei šio dydžio kitimas peržengia 3% ribą tikėtina, kad modeliavimas nebus sėkmingai baigtas, nes kilę realių problemų su atminties valdymu.

Dar viena įprasta klaida – išplautų arba nusėdusių teršalų masės mažėjimas. Modelyje priimta nuostata, kad išplauti arba nusėdę teršalai nebepakyla, tad pastebėjus šių dydžių mažėjimą belieka stabdyti modeliavimą ir pakeitus nustatymus paleidinėti iš naujo. Paprastai dalelių skaičiaus pakeitimas nustatymuose šią problemą išsprendžia.

Labai patogiu naudotis šiais duomenimis skaičiuojant kaip dalelės pajudėjo per laiko žingsnį. Spartus išplautų dalelių judėjimas paprastai rodo skaičiavimo plote esant kritulius, o dalelių ar teršalų masės nemažėjimas ore rodo nepalankias teršalams sklaidytis sąlygas.

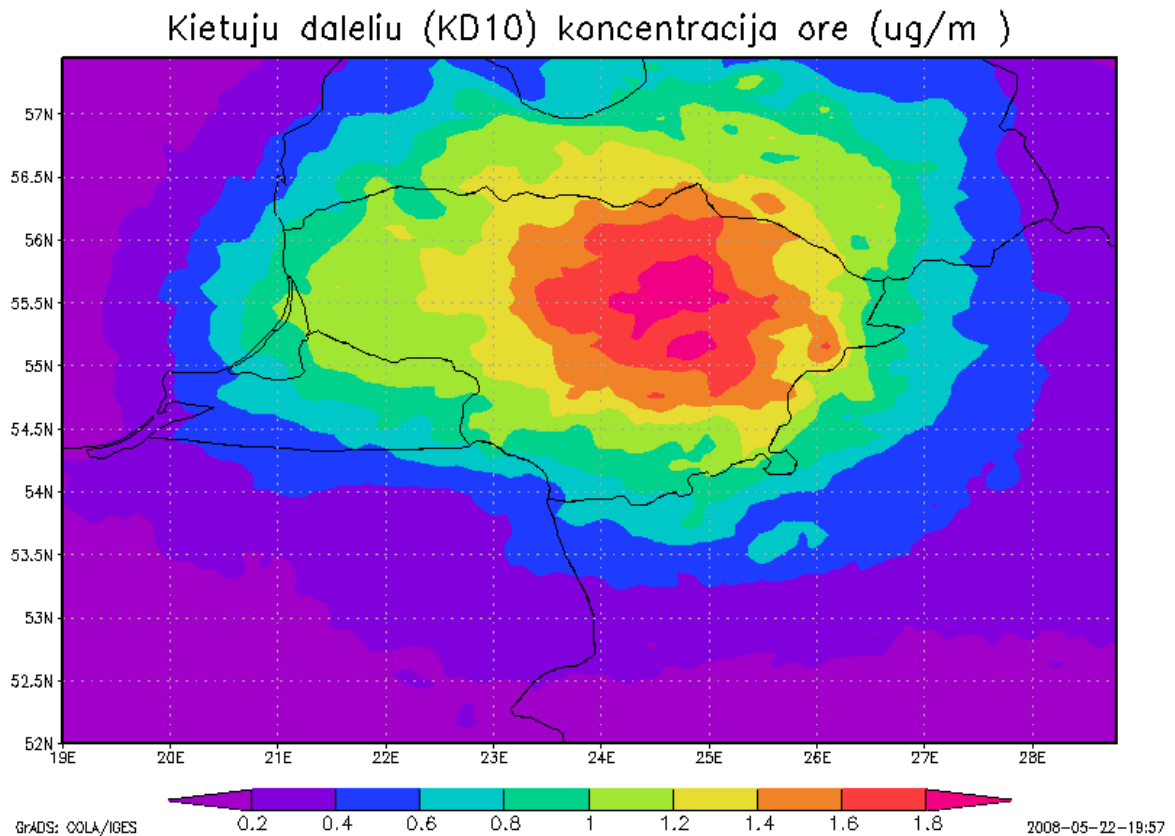
2.6 Sumodeliuota vidutinė kietųjų dalelių (KD10) koncentracija ore (2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.)

Vienas iš daugiausiai apie kietųjų dalelių pernašą pasakančių dydžių yra vidutinė jų koncentracija ore. Buvo atliktas kietųjų dalelių (aerodinaminis dydis iki 10 mikrometrų t.y. KD10) dispersijos modeliavimas (periodas - 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.). Naudojantis šio modeliavimo rezultatais apskaičiuota vidutinė KD10 koncentracija ore įvairiuose atmosferos sluoksniuose. Nors skaičiai akivaizdžiai maži (miestuose esančio stotelės fiksuoja bent 10 kartų didesnes koncentracijas), bet reikia žinoti, kad modeliuojamos tik pirminės ir tik iš Lietuvos teritorijoje esančių šaltinių patenkančios kietosios dalelės. Be to į koncentraciją neįtrauktos pakartotinai nuo žemės pakeltos anksčiau nusėdę dalelės. Toliau pateiktos iliustracijos atitinka 0-25, 25-100, 100-200, 200-600, 600-1350 metrų sluoksnius nuo žemės paviršiaus. Akivaizdžiai matoma, kad vidutinė KD10 koncentracija beveik atitinka didžiąją dalį teršalų išmetantį Lietuvos regioną t.y. Vilniaus ir Kauno savivaldybių ribojamą plotą. Yra ~50-80km pasislinkimas į Šiaurės Rytus pažemio sluoksnyje, tad galima teigti, kad Lietuvoje esančių emisijos šaltinių išmesti teršalai kaupiasi ir cirkuliuoja apatiniuose atmosferos sluoksniuose. Pagal modelio veiklos ataskaitas gautas po šio modeliavimo matyti, kad ~40% visos teršalų masės „palieka“ modeliuojamą plotą.

Kietųjų dalelių pasiskirstymas atmosferos sluoksniuose taip pat matomas pagal šias iliustracijas. Dauguma teršalų cirkuliuoja iki 600m aukščio esančiuose sluoksniuose

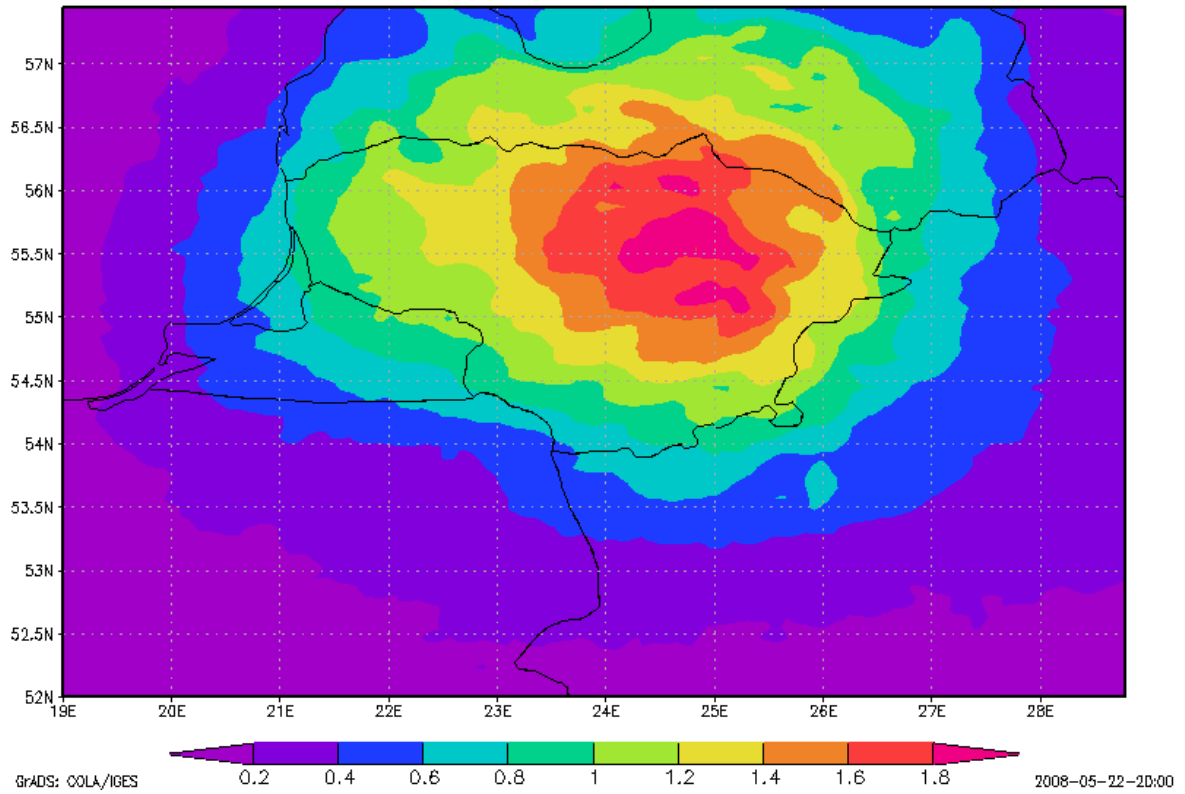
(tikėtina, kad tai stambiosios KD10 frakcijos) ir tik nedidelė dalis teršalų pakliūna aukščiau, tačiau būtent aukščiau pakliuvę teršalai pernešami tolimesnius atstumus.

Pagal gautus duomenis galima teigti, kad modeliuojamuoju laikotarpiu KD10 pernašos kryptis apatiniuose troposferos sluoksniuose yra ŠŠR (Šiaurės Šiaurės Rytus), o aukštesniuose troposferos sluoksniuose į Šiaurę. Šio teiginio pagrindu galima daryti prielaidą, kad jei jau Lietuvos emisijos šaltinių išmetami teršalai pernešami nors ir netoli, bet Šiaurės kryptimi, tai daugiausia teršalų į Lietuvos teritoriją turėtų būti atnešama iš Lenkijos.



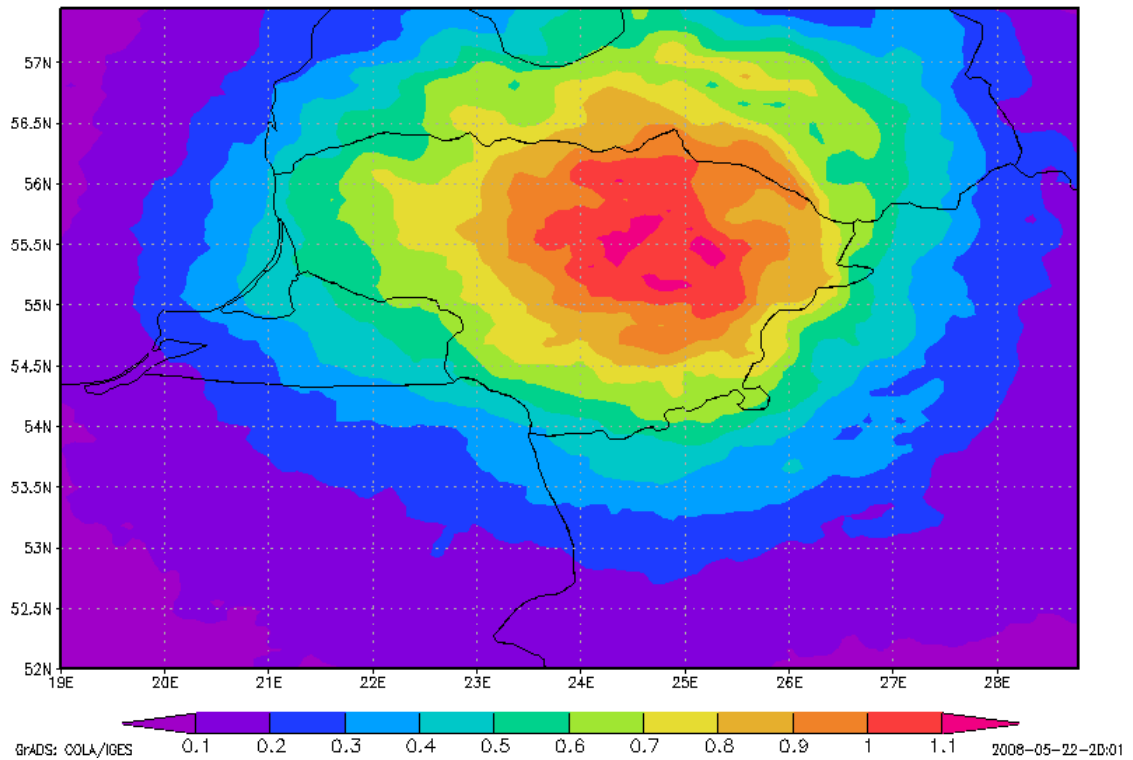
9 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 0-25m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



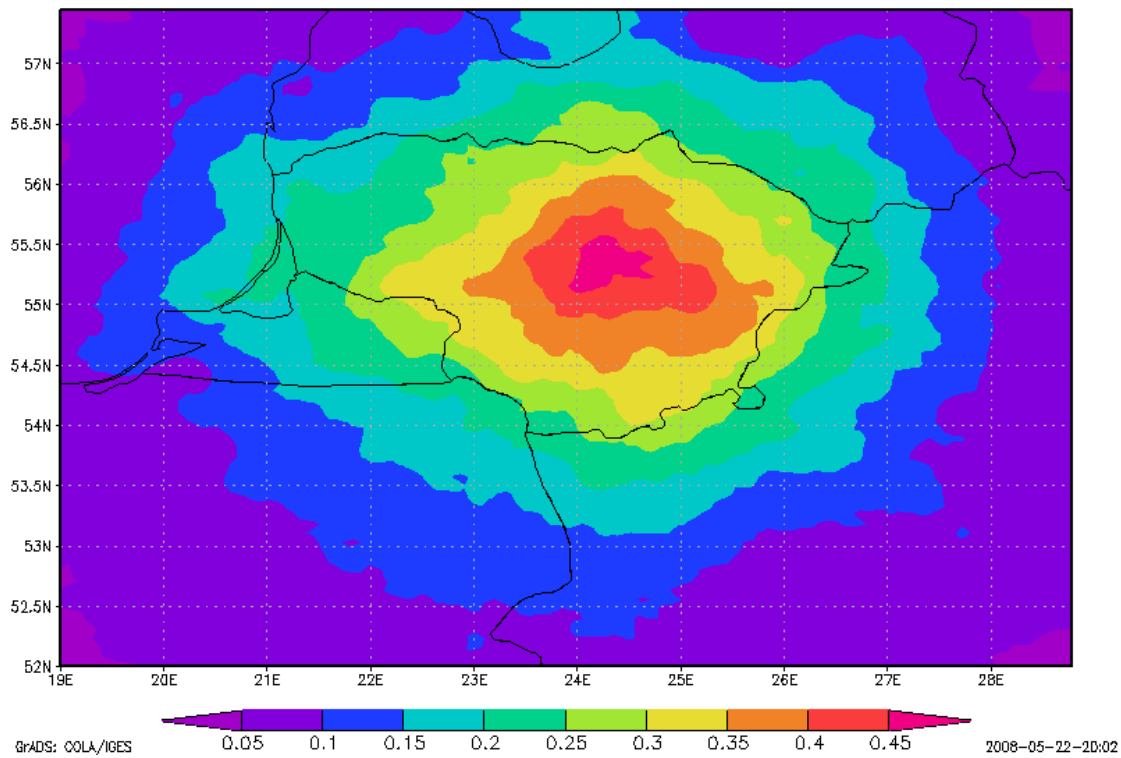
10 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 25-100m nuo žemės paviršiaus sluksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



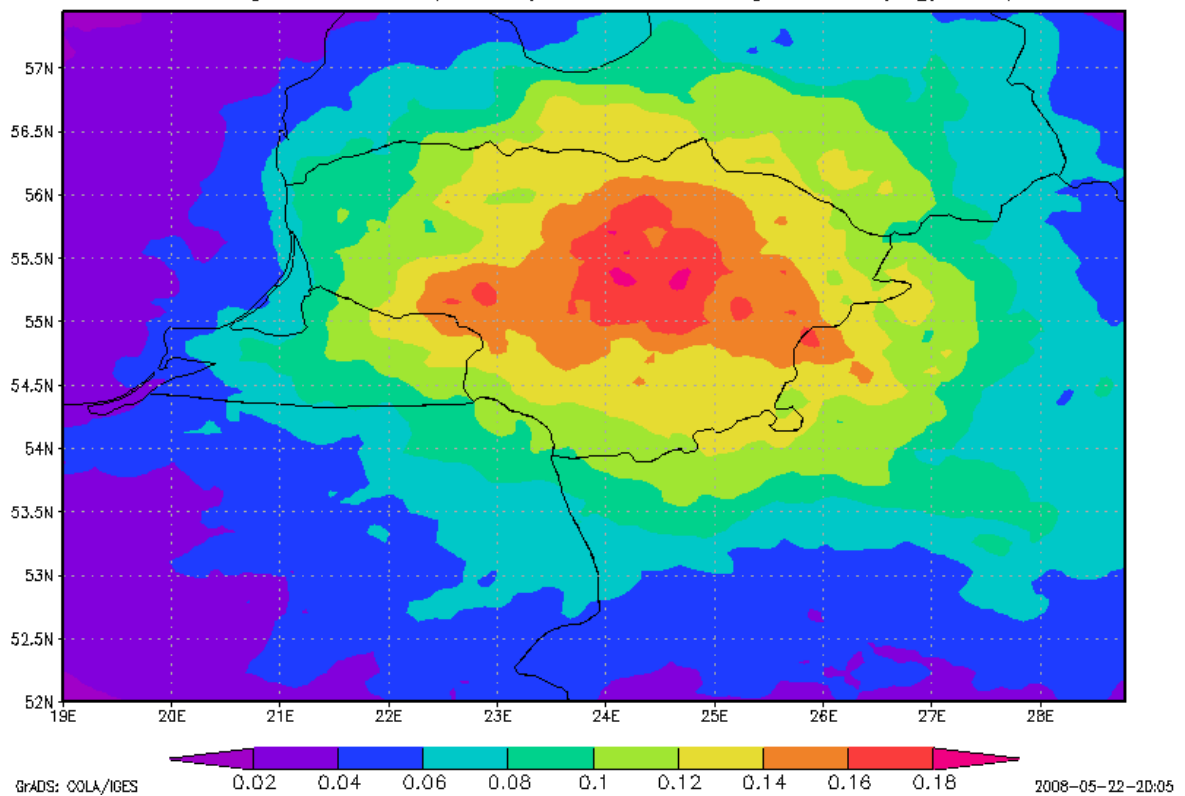
11 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 100-200m nuo žemės paviršiaus sluksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



12 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 200-600m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.

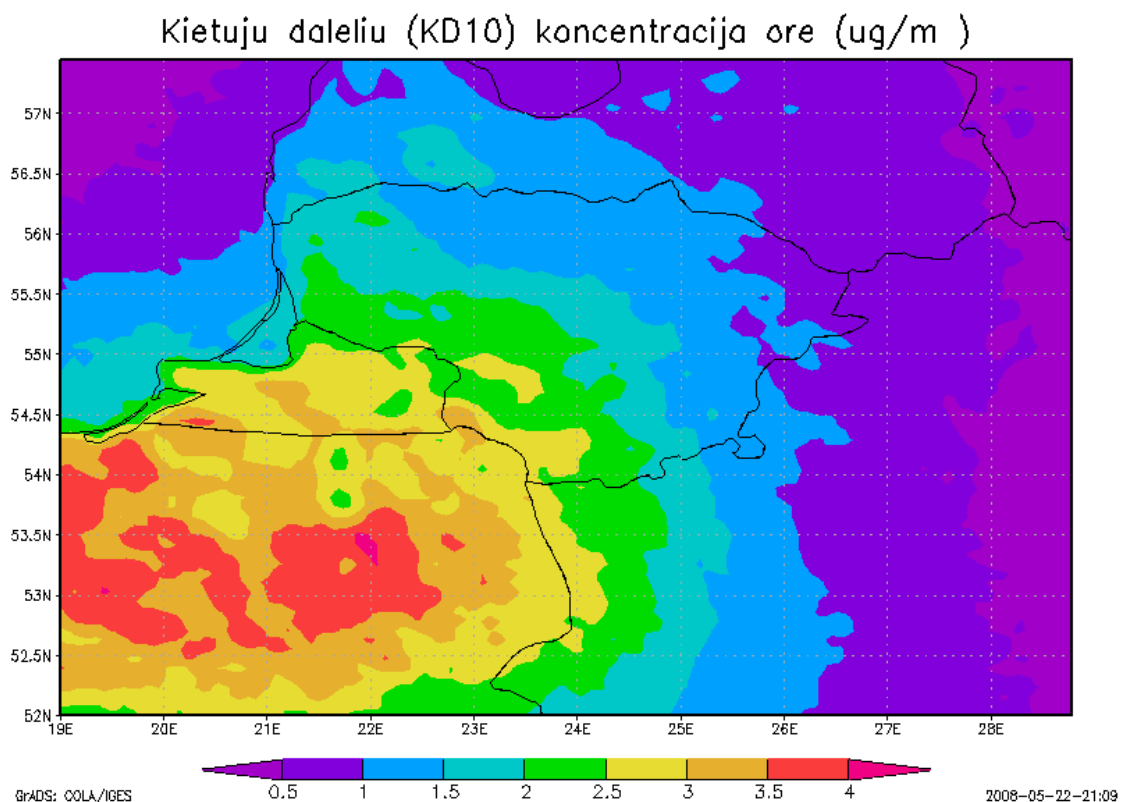
Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



13 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 600-1350m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.

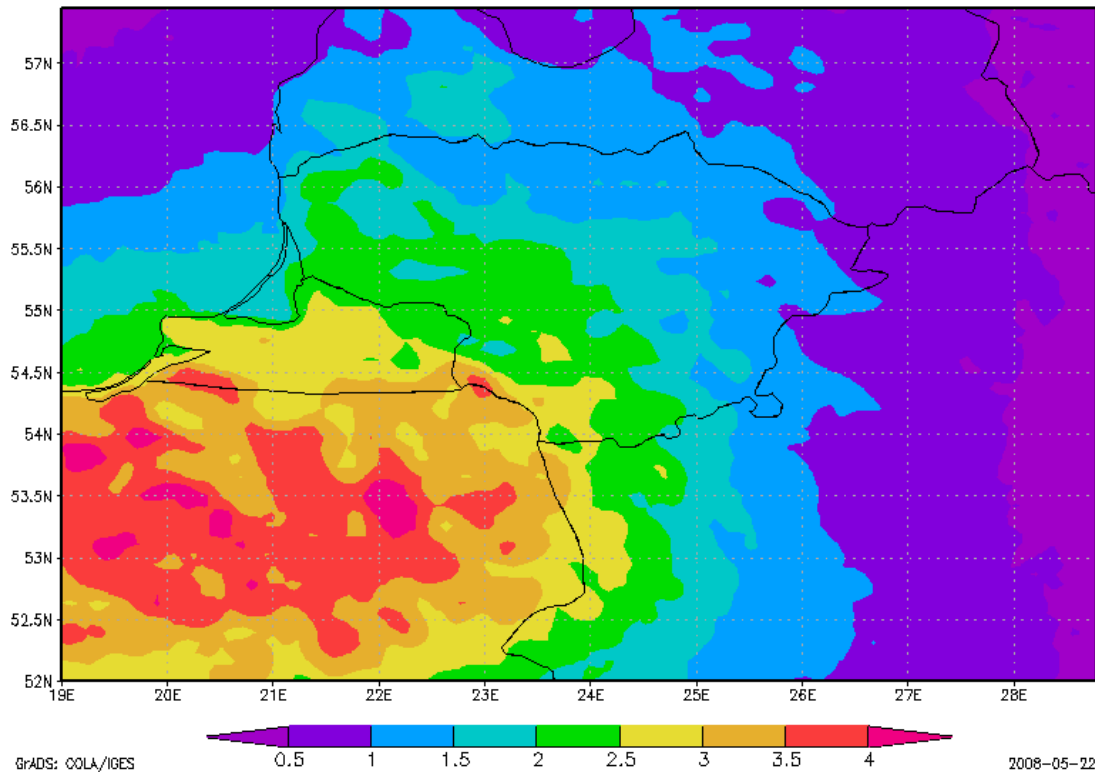
Remiantis prielaida, kad Lenkijos emisijos šaltinių tarša pernešama į Lietuvos teritoriją buvo atliktas modeliavimas su lenkijos emisijos duomenimis tą patį laikotarpį. Deja, meteorologiniai duomenys neapima visos Lenkijos teritorijos (prarandama ~10% teritorijos, reiškia ir emisijos). Tačiau pietinėje Lenkijos dalyje esančios kasyklos ir metalurgijos pramonės emisija įeina į tuos apimamus 90% Lenkijos teritorijos, tad pavojingiausi Lietuvai Lenkijos emisijos šaltiniai neprarandami. Lenkijos kietųjų dalelių (KD10) emisija per metus iš visos teritorijos yra ~30 kartų didesnė nei Lietuvos, tuo tarpu teritorija didesnė tik ~5 kartus, o gyventojų daugiau ~10 kartų. Tokius teršalų kiekius išmeta pagrįdė kasyklos ir metalurgijos pramonė.

Iš gautų modeliavimo rezultatų sudaryti tų pačių sluoksnių, tos pačios teritorijos ir to paties laikotarpio KD10 vidutinės koncentracijos žemėlapiai t.y. esminis skirtumas, kad visas teršalų išmetimas yra iš lenkijos teritorijos.



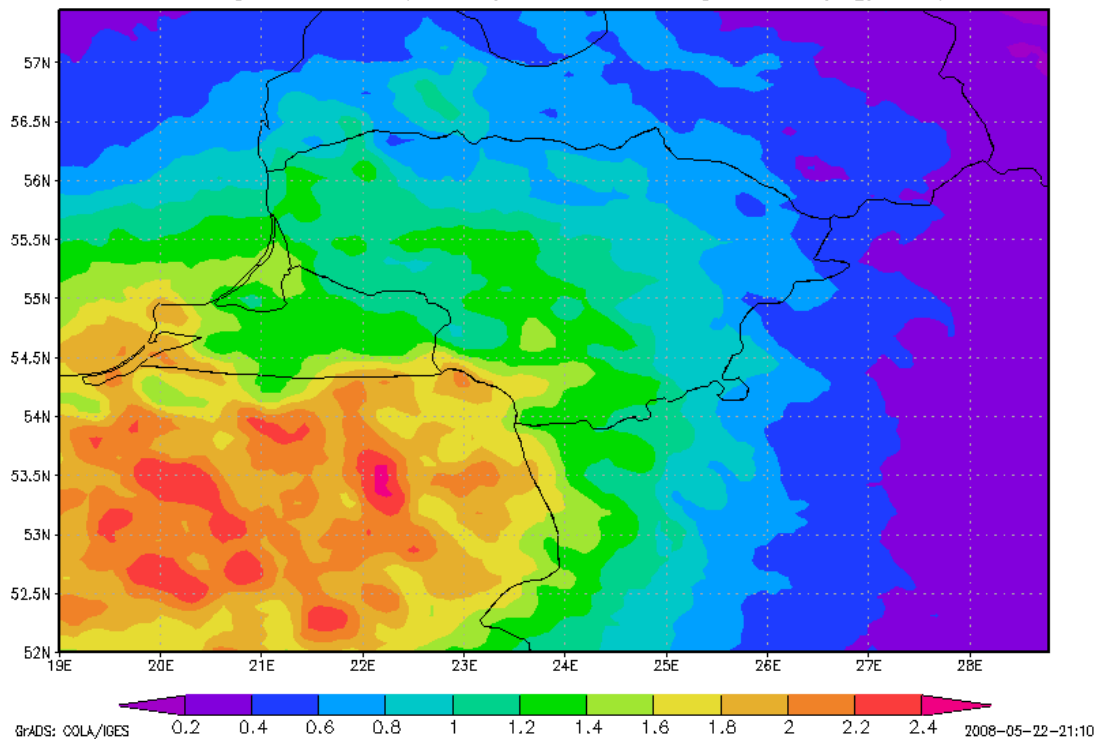
14 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 0-25m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



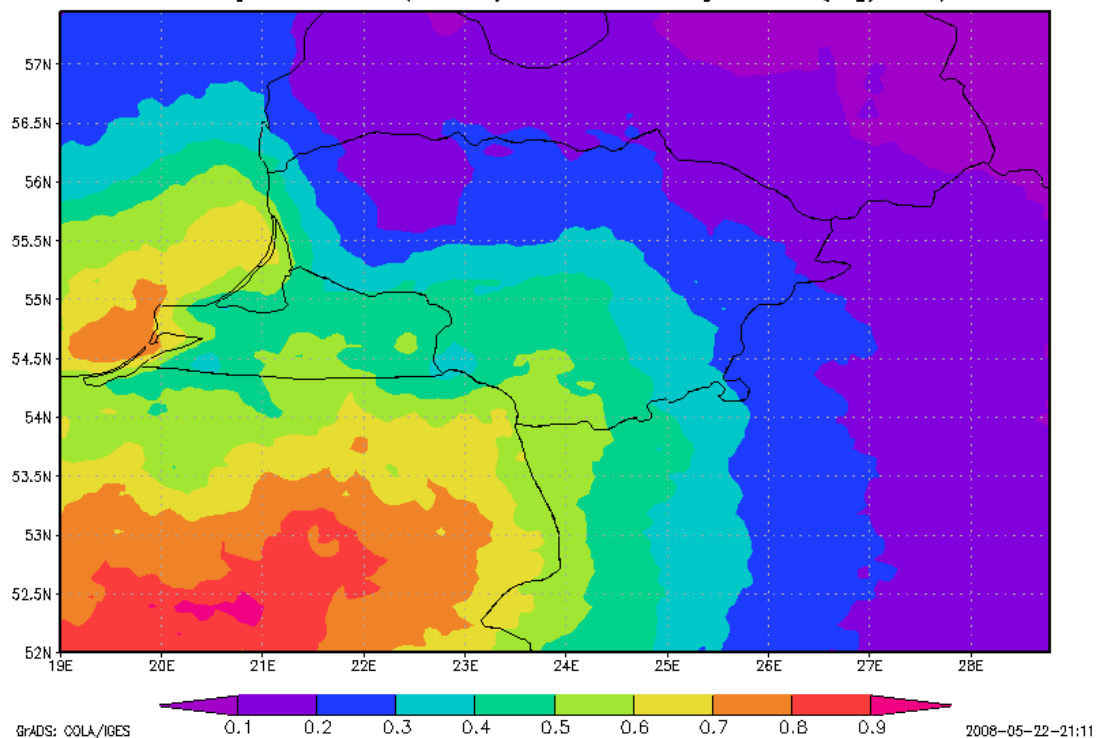
15 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 25-100m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



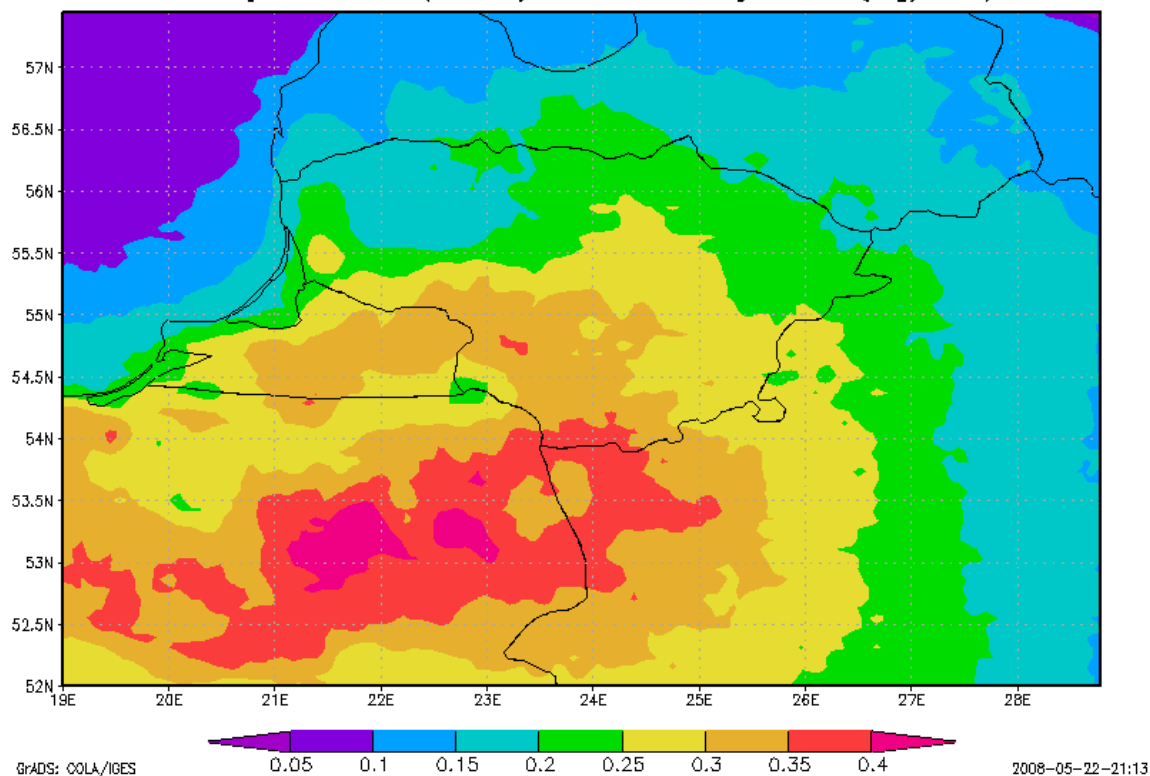
16 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 100-200m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



17 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 200-600m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



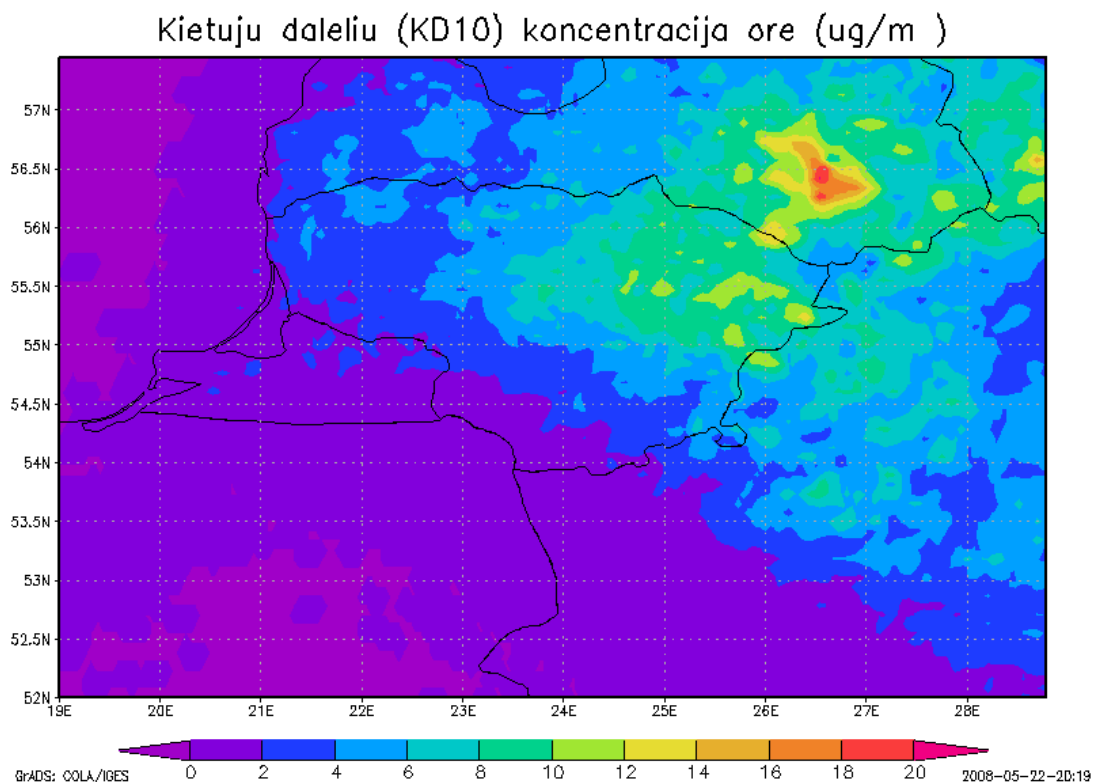
18 pav. Pirminių KD10 vidutinė koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 600-1350m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).

Pagal gautus modeliavimo rezultatų analizės rezultatus galima spręsti, kad prielaida dėl kietųjų dalelių pernašos iš Lenkijos teritorijos dalinai pasitvirtino. Iš esmės pernaša nėra į šiaurę. Tiksliau būtų teigti, kad teršalai daugmaž vienodai nuo Lenkijos sklinda į visas puses (išskyrus sklidimą į vakarus, nes ten dėl gausios drėgmės ir didesnio vėjingumo virš Baltijos jūros teršalai itin sparčiai išsimaišo, nusėda arba iškrinta surišti su drėgme).

Kietųjų dalelių pernaša iš Lenkijos teritorijos labai skiriasi ir pagal sluoksnius. Žemiausiuose troposferos sluoksniuose (0-200m) didesni teršalų kiekiai (tikėtina stambesnės frakcijos) pernešami iki Suvalkijos, o aukštesniuose sluoksniuose ir giliau į Lietuvos teritoriją. Kiek teršalų pernešama leidžia spręsti vidutinė KD10 koncentracija, nes jai palaikyti reikalingi pakankami teršalų kiekiai, o kadangi modeliavimas atliktas tik su Lenkijos emisijos šaltinių duomenimis (arba pirmuoju atveju Lietuvos), tai iš niekur kitur modeliuojant teršalai patekti ir negalėjo.

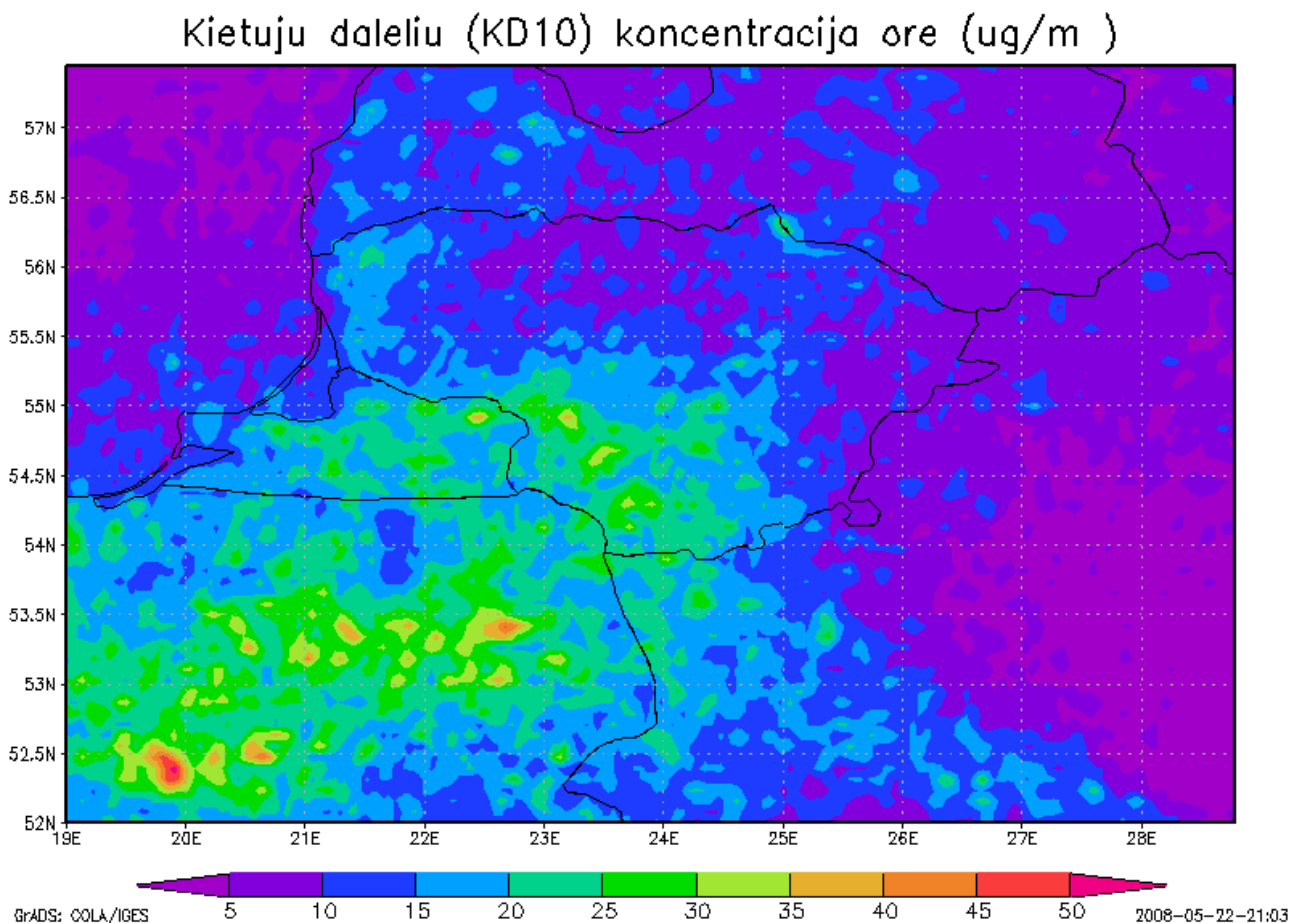
2.7 Sumodeliuota maksimali kietųjų dalelių (KD10) koncentracija ore (2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.)

Turint ankstesniame skyriuje minėtus modeliavimo rezultatus (tiek su Lietuvos, tiek su Lenkijos emisijos šaltiniais) naudojant vizualizacijai *Grads* programinį paketą buvo nubrėžti ir maksimalios taršos žemėlapiai.



19 pav. Pirminių KD10 maksimali koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 0-25m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lietuvos teritorijos).

Maksimali KD10 koncentracija ore 0-25m sluoksnyje atliekant modeliavimą su Lietuvos emisijos šaltinių duomenimis per 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. laikotarpį yra ~10 kartų didesnė nei vidutinė, tačiau ~2 kartus mažesnė, nei atliekant modeliavimą su Lenkijos emisijos šaltinių duomenimis. Vienavertus, tai gali reikšti išmetamų teršalų kiekio skirtumus tarp Lietuvos ir Lenkijos. Antravertus, yra žinoma atveju, kuomet nekintant emisijos intensyvumui dėl nepalankių meteorologinių sąlygų KD10 koncentracijos ore išaugo virš 20 kartų. Šiuo atveju 19 pav. Matoma aukšta KD10 koncentracija virš Latvijos yra sąlygota grynai nepalankių meteorologinių sąlygų t.y. teršalai iš Lietuvos buvo vis nešami į tą teritoriją, o sąlygos jiems išsisklaidyti buvo nepalankios. Panaši situacija susidarė ir esant teršalų pernašai iš Lenkijos į Lietuvą.



20 pav. Pirminių KD10 maksimali koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) ore 0-25m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).

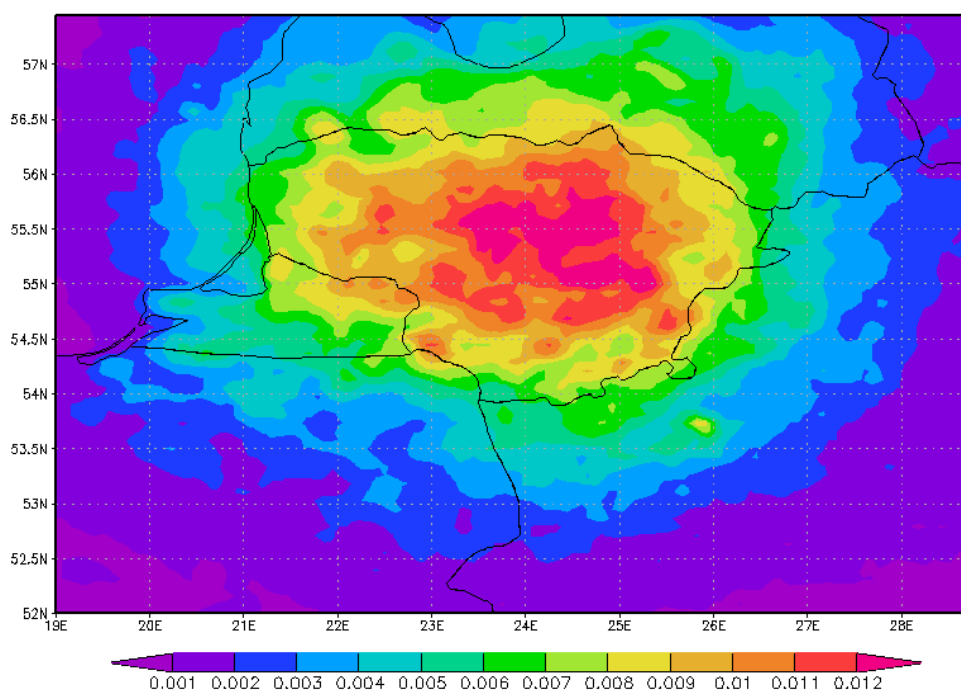
2.8 Kietųjų dalelių (KD10) išplovimas ir nusėdimas (2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn.)

Ankstesniuose darbo skyriuose analizuojant vidutinę KD10 koncentraciją įvairiuose sluoksniuose nustatyta, jog žemesniuose sluoksniuose teršalai paprastai pernešami mažesniu atstumu, o aukštesniuose – didesniu. Akivaizdu, kad aukštesniuose sluoksniuose esančios kietosios dalelės šaliai nerūpi tol, kol nenusileidžia į priežeminius sluoksnius arba nėra išplaunamos. Tad, šiame darbe susidomėta ir kiek KD10 nusėda/išplaunama (21, 22 pav.) arčiau nei jos natūraliai turėtų nukeliauti.

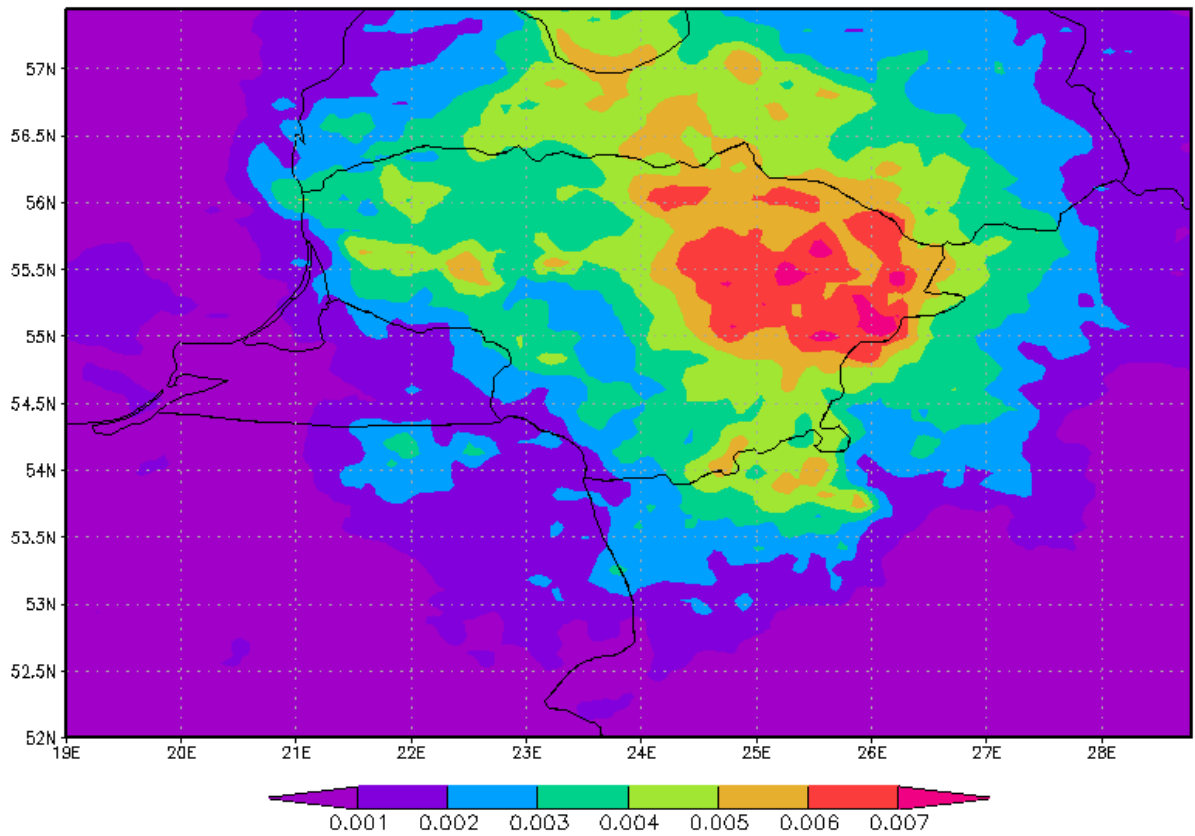
Paprastai iškritusiomis su krituliais arba nusėdusiomis dalelėmis nelabai domimasi, ypač jei jos mineralinės prigimties, o ne sintetinės ar rūgštinės (o juo labiau turinčios kancerogeninių požymių). Derėtų atkreipti dėmesį ir į šią teršalų dalį, nes:

- Nusėdę arba išplautos ir išdžiuavę kietosios dalelės gali būti lengvai pakeliamos į orą taip padidinant jau esamą koncentraciją ore.
- Paprastai sparčiai nusėda arba yra išplaunama gana didelė teršalų dalis.
- Esant krituliams (išplovimo atveju) arba palankioms sąlygoms nusėdimui į priežeminius sluoksnius patenka tos dalelės, kurios paprastai yra tokia aukštyje, kuriame tiesiogiai žalos žmonių sveikatai nedaro. Be to nusėdimu/išplovimu sulaikomos „tranzitinės“ kietosios dalelės.

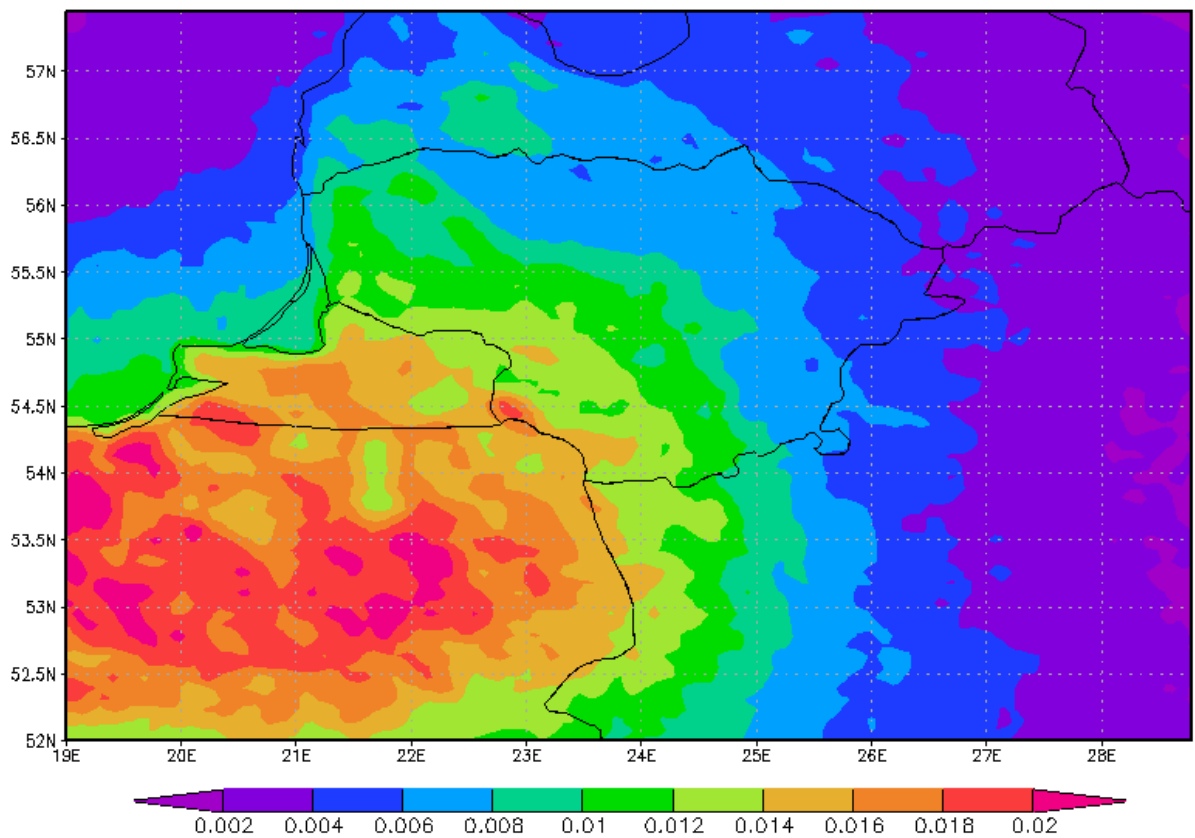
Didžioji dalis Lietuvos emisijos šaltinių išmestų į atmosferą kietųjų dalelių tiek išplovimo tiek nusėdimu būdu iškrinta Lietuvoje. Papildomai Lietuvos teritorijoje išplaunama ir nusėda nemaža dalis iš Lenkijos atkeliavusių KD10.



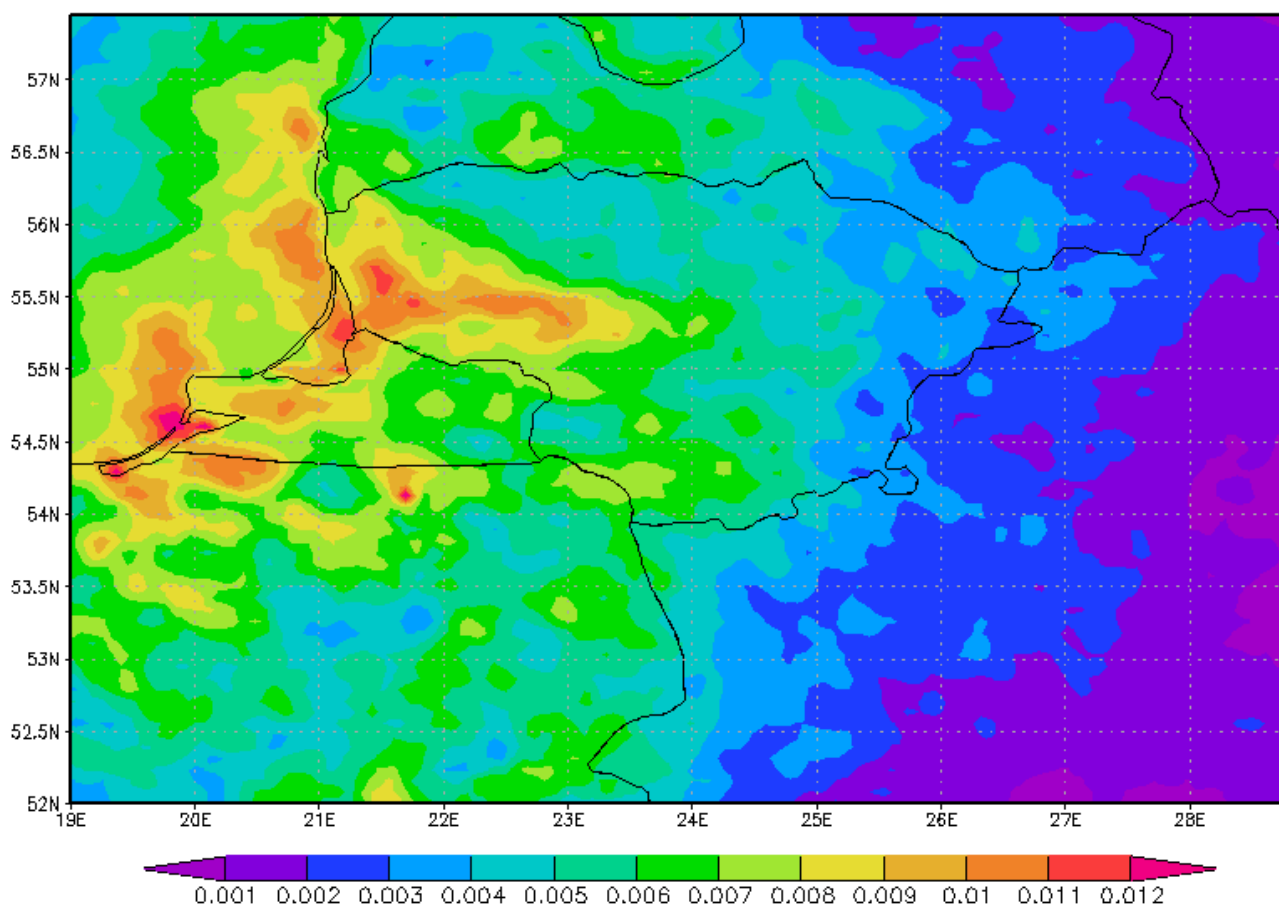
21 pav. Pirminių KD10 nusėdimas ($0,1\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$) ant žemės paviršiaus 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lietuvos teritorijos).



22 pav. Pirminių KD10 išplovimas ($\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$) ant žemės paviršiaus 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lietuvos teritorijos).



23 pav. Pirminių KD10 nusėdimas ($0,1\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$) ant žemės paviršiaus 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).



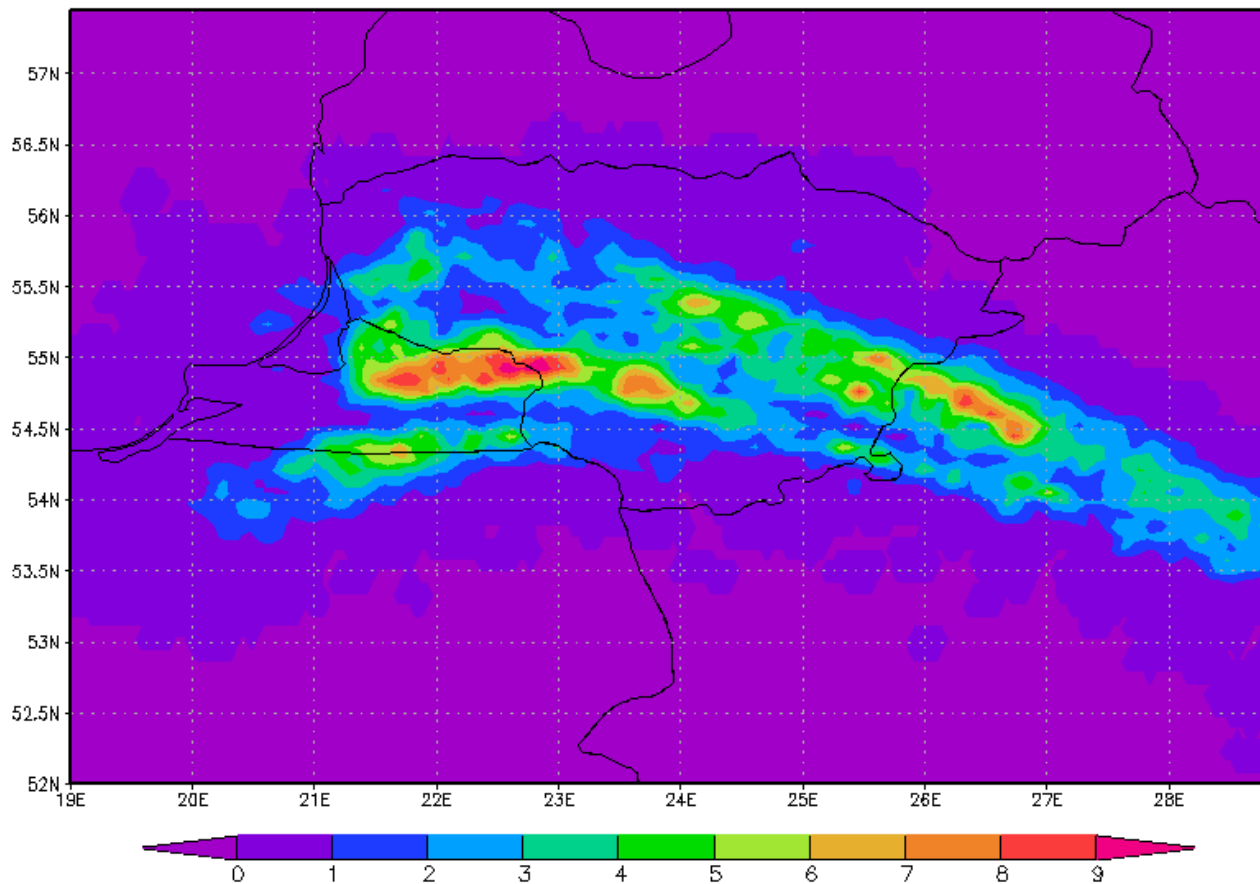
24 pav. Pirminių KD10 išplovimas ($\mu\text{g}/\text{m}^2\text{s}$) ant žemės paviršiaus 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. (emisija iš Lenkijos teritorijos).

2.9 Išskirtiniai KD10 pernašos atvejai

Atliekant modeliavimą ir vėliau analizuojant jo rezultatus nustatyta keletas atvejų, kuomet susidarė išskirtinės sąlygos ir pernašos ypatumus galima paaiškinti tik meteorologinėmis sąlygomis. Atliekant modeliavimą su Lietuvos emisijos šaltinių duomenimis išskirti du atvejai (panašių atvejų pasitaikė ir daugiau, bet išskirti charakteringiausi), o atliekant modeliavimą su Lenkijos emisijos šaltinių duomenimis išskirtas vienas atvejis:

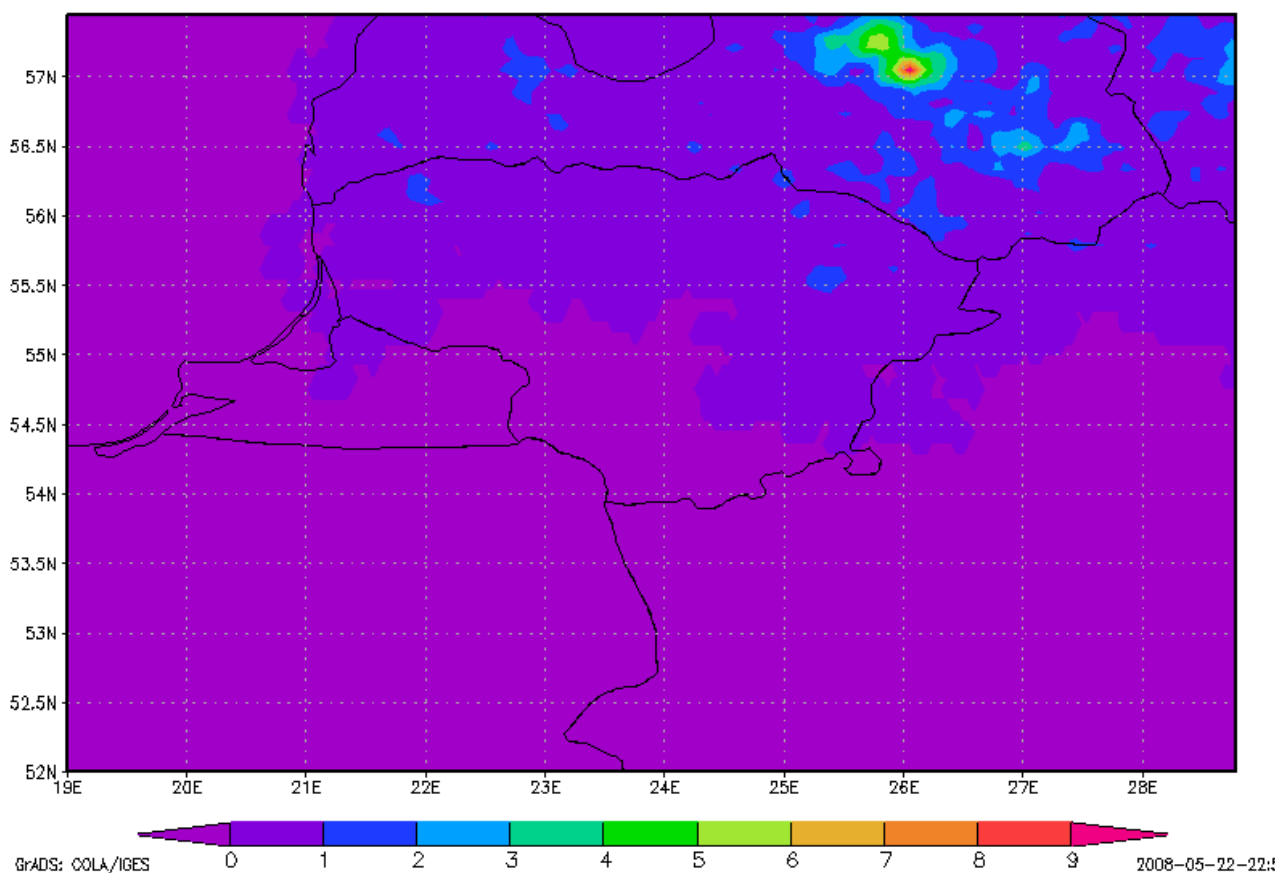
- 2007 lapkričio mėn. 12d. 21:00 (su Lietuvos emisijos šaltinių duomenimis) – 0-25m nuo žemės paviršiaus sluoksnyje padidėjęs KD10 koncentracijos ore siauras „ruožas“ Lietuvoje (25 pav.). Nors emisijos intensyvumas išliko toks pats, bet KD10 koncentracija ore išaugo kelis kartus. Šio darbo priede Nr.2 pateikti įvairūs meteorologiniai duomenys, kurie parodo, jog kaip tik „ruožo“ atsiradimo metu toje vietoje buvo silpnas vėjas, žema turbulencija (turbulencijo praktiškai visai nebuvo), žemas atmosferos paribio sluoksnis, panašaus „ruožo“ pavidalo nedidelė

temperatūros anomalija palyginus su aplinkiniais rajonais. Visi šie veiksniai ir lėmė minėtą didesnės KD10 koncentracijos ore „ruožo“ atsiradimą.



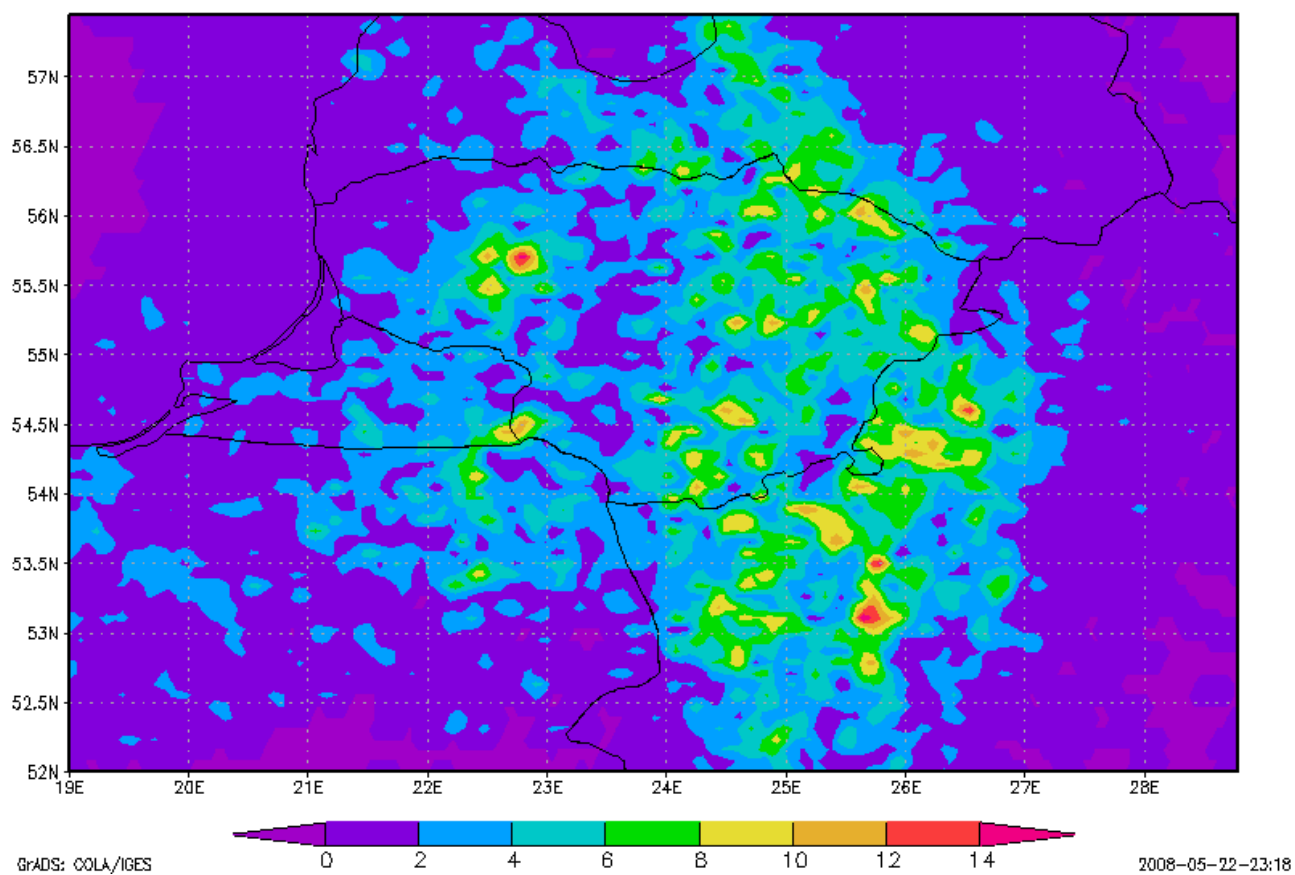
25 pav. Padidėjusios KD10 koncentracijos ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) „ruožas“ 0-25m sluoksnyje virš žemės paviršiaus 2007 lapkričio mėn. 12d. 21:00.

- 2007 lapkričio mėn. 25d. 12:00 (su Lietuvos emisijos šaltinių duomenimis) – visoje Lietuvoje labai žema KD10 koncentracija (26 pav.). Darbo priede Nr.3 pridedami šio išskirtinio atvejo meteorologiniai duomenys bei KD10 koncentracija kituose sluoksniuose. Pagal meteorologinius duomenis ir išvestinius parametrus matyti, kad atmosferos paribio sluoksnis aukštas, Monin-Obukhov ilgis artimas nuliui, Ričardsono skaičius taip pat artimas nuliui, o vėjas nėra silpnas, be to turbulentiškumo Kolmogorov-Zakharov rodiklis $\sim 0,3$ t.y. aplinka turbulentiška, todėl kietosioms dalelėms geros sąlygos išsimaišyti visoje atmosferos paribio sluoksnio storumėje.



26 pav. Itin žema KD10 koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) visoje Lietuvoje 0-25m sluoksnyje virš žemės paviršiaus 2007 lapkričio mėn. 25d. 12:00.

- 2007 lapkričio mėn. 7d. 18:00 (su Lenkijos emisijos šaltinių duomenimis) – 0-25m sluoksnyje virš žemės paviršiaus ganėtinai aukšta KD10 koncentracija (27 pav.) (ypač rytų Lietuvoje, kur nuotolis nuo Lenkijos yra didesnis nei vakarų ar vidurio Lietuva). Šio darbo priede Nr. 4 pateikti šio išskirtinio atvejo atsiradimo laiką atitinkantys meteorologiniai duomenys bei išvestiniai rodikliai rodo, kad nors vėjas vidutinio stiprumo, tačiau atmosferos paribio sluoksnio aukštis būtent tose vietose kur padidėjusi koncentracija yra nedidelis ir esant tokioms sąlygoms maišymasis nors ir gerai, bet vyksta labai nedidelėje storumėje.



27 pav. Aukšta KD10 koncentracija ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) rytų Lietuvoje 0-25m sluoksnyje virš žemės paviršiaus 2007 lapkričio mėn. 7d. 18:00.

IŠVADOS

1. Lietuvoje nėra detalių emisijos duomenų, tačiau iš tų, kurie yra, juos interpoliuojant ir apjungiant, galima išgauti pakankamą detalumą dispersijos modeliavimui šalies mastu.
2. Lietuvoje yra visos sąlygos atlikti teršalų dispersijos modeliavimą ir net pateikti taršos prognozes.
3. Darbe naudotas SILAM modelis pateikia pakankamai tikslius rezultatus, kad būtų galima nustatinėti pernašos ypatybes šalies mastu.
4. Laiko atžvilgiu efektyviam ir tiksliam SILAM modelio naudojimui būtinas tinkamas nustatymų rinkinys, kuris kiekvienu individualiu atveju yra specifinis.
5. SILAM modelis nėra kurtas lengvam naudojimui t.y. šio modelio galimybės yra labai plačios, bet jam įsisavinti reikia daug laiko. Viena iš pagrindinių priežasčių - dokumentacijos trūkumas.
6. SILAM modelis pateikia daug naudingų tarpinių rezultatų.
7. Pagal atliktų modeliavimų rezultatus matyti, kad pagrindinė kietųjų dalelių taršos dalis laikosi priežeminiuose troposferos sluoksniuose ir pernešama netoli (šis braižas verčia manyti, kad tai stambiosios frakcijos). Tuo tarpu į aukštesnius sluoksnius patenka keletą ir net keletą dešimčių kartų mažesnė kietųjų dalelių dalis, bet jos pernešamos toliau.
8. Pagal gautus duomenis galima teigti, kad modeliuojamuoju laikotarpiu (2007 m. spalio mėn - 2008 m. balandžio mėn.) KD10 pernašos kryptis apatiniuose troposferos sluoksniuose yra ŠŠR (Šiaurės Šiaurės Rytus), o aukštesniuose troposferos sluoksniuose į Šiaurę. Šio teiginio pagrindu galima daryti prielaidą, kad jei jau Lietuvos emisijos šaltinių išmetami teršalai pernešami nors ir netoli, bet Šiaurės kryptimi, tai daugiausia teršalų į Lietuvos teritoriją turėtų būti atnešama iš Lenkijos.
9. Pagal gautus modeliavimo rezultatų analizės rezultatus galima spręsti, kad prielaida dėl kietųjų dalelių pernašos iš Lenkijos teritorijos dalinai pasitvirtino. Iš esmės pernaša nėra į šiaurę. Tiksliau būtų teigti, kad teršalai daugmaž vienodai nuo Lenkijos sklinda į visas puses (išskyrus sklidimą į vakarus, nes ten dėl gausios drėgmės ir didesnio vėjingumo virš Baltijos jūros teršalai itin sparčiai išsimaišo, nusėda arba iškrinta surišti su drėgme).

10. Kietųjų dalelių pernaša iš Lenkijos teritorijos labai skiriasi ir pagal sluoksnius. Žemiausiuose troposferos sluoksniuose (0-200m) didesni teršalų kiekiai (tikėtina stambesnės frakcijos) pernešami iki Suvalkijos, o aukštesniuose sluoksniuose ir giliau į Lietuvos teritoriją. Kiek teršalų pernešama leidžia spręsti vidutinė KD10 koncentracija, nes jai palaikyti reikalingi pakankami teršalų kiekiai, o kadangi modeliavimas atliktas tik su Lenkijos emisijos šaltinių duomenimis (arba pirmuoju atveju Lietuvos), tai iš niekur kitur modeliuojant teršalai patekti ir negalėjo.
11. Maksimali KD10 koncentracija ore 0-25m sluoksnyje atliekant modeliavimą su Lietuvos emisijos šaltinių duomenimis per 2007 m. Spalio mėn. – 2008 m. Balandžio mėn. laikotarpį yra ~10 kartų didesnė nei vidutinė, tačiau ~2 kartus mažesnė, nei atliekant modeliavimą su Lenkijos emisijos šaltinių duomenimis.
12. Didžioji dalis Lietuvos emisijos šaltinių išmestų į atmosferą kietųjų dalelių tiek išplovimo tiek nusėdimo būdu iškrinta Lietuvoje. Papildomai Lietuvos teritorijoje išplaunama ir nusėda nemaža dalis iš Lenkijos atkeliavusių KD10.
13. Modeliuojamu laikotarpiu pasitaikė keletas išskirtinių atvejų (charakteringiausi aprašyti darbe). Šiuos išskirtinius atvejus galima skirstyti į tris dalis: KD10 koncentracija ore smarkiai sumažėja dėl pagerėjusių meteorologinių sąlygų; dėl įvairių meteorologinių sąlygų sutapimo KD10 koncentracija ore gali išaugti nuo keletos iki 10 kartų; susiklosčius palankioms meteorologinėms sąlygoms, labai didelė teršalų dalis (net didesnė už vietinę) gali būti atnešama iš kaimyninių valstybių.

Rekomendacijos:

Dėl didelio duomenų kiekio reikia planuoti tyrimus su labai didele laiko atsarga, nes modelių (kartais ir techninės įrangos) patikimumas dar nėra itin aukštas, o modeliavimui reikalingas laikas ilgas, todėl didelė tikimybė (tai dažnai pasikartoja ir praktikoje) modeliavimas nutrūksta dėl modelio ar techninės įrangos klaidos ir vėl būtinas paleidimas iš naujo.

Esant visoms sąlygoms naudoti SILAM modelį oro kokybės prognozėms rengti patartina pasinaudoti šia galimybe. Tereikia pasitikslinti emisijos duomenis ir pasirūpinti tinkama technine įranga. Lietuvos hidrometeorologijos tarnybos prie Aplinkos ministerijos tarnybinėse stotyse įdiegtas SILAM modelis ir dalis šiam darbui būtinų skaičiavimų atlikta jose, bet operatyvus modelio darbas rengiant prognozes neįmanomas dėl mažų resursų t.y. jei pradėtų operatyviai veikti SILAM sutriktų kiti darbai.

LITERATŪRA

1. *Atmospheric Pollution* (1972). Bach W., Mc-Graw - Hill Book Company.
2. Bickel P.J., Lehmann E.L. (1976). Descriptive Statistics for Nonparametric Models. III. Dispersion, *The annals of Statistics* **4** (6): 1139-1158.
3. Borgegard Lars-Erik and etc. (1995). Population Redistribution in Sweden: Long Term Trends and Contemporary Tendencies, *Geografiska Annaler. Series B, Human Geography* **77** (1): 31-45.
4. Boshnakov G. (1998). Applications of Time Series Analysis in Astronomy and Meteorology, *The Statistician* **47** (1): 231-233.
5. Collins C. O., Scott S. L. (1993). Air Pollution in the Valley of Mexico, *Geographical Review* **83** (2): 119-133.
6. Cramer J. C. (1998). Population Growth and Air Quality in California, *Demography* **35** (1): 45-56.
7. Cramer J. C. (2002). Population Growth and Local Air Pollution: Methods, Models, and Results, *Population and Development Review*, (28) Supplement: *Population and Environment: Methods and Analysis*: 22-52.
8. Greenland D.(1980). Atmospheric Dispersion in a Mountain Valley, *Annals of the Association of American Geographers* **70** (2): 199-206.
9. *Air Quality Analysis for Urban Transportation Planning* (1982). Horowitz J. L., Cambridge, MIT Press.
10. Jackson M. (2000). Mathematical Modeling in the Environment, *The American Mathematical Monthly* **107** (5): 474-478.
11. Kalkstein L. S., Corrigan P. (1986). A Synoptic Climatological Approach for Geographical Analysis: Assessment of Sulfur Dioxide Concentrations, *Annals of the Association of American Geographers* **76** (3): 381-395.
12. Kaasik M., Prank M., Sofiev M., (2007) Running the SILAM model comparatively with ECMWF and HIRLAM meteorological fields a case study in Lapland. *COST-728/NetFAM workshop on "Integrated systems of meso-meteorological and chemical transport models"* DMI, Copenhagen, 21-23 May 2007
13. Kennedy M. C., O'Hagan A. (2001) Bayesian Calibration of Computer Models, *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* **63** (3): 425-464.

14. Kohn R. E. (1971). Optimal Air Quality Standards, *Econometrica* **39** (6): 983-995.
15. Kohn R. E. (1972). A Cost-Effectiveness Model for Air Pollution Control with a Single Stochastic Variable. *Journal of the American Statistical Association*, **67** (337): 19-22.
16. *Models of Repeated Measurements* (1993). Lindsey J. K., New York, Oxford University Press.
17. Metcalfe S. E., Derwent R. G. (1989). Modelling Acid Deposition and the Possible Effects of Emission Controls, *The Geographic Journal* **155** (3): 367-377.
18. Metcalfe S. E., Whyatt D. (1995). Who to Blame for Acid Rain? A Regional Study of Acid Deposition in Yorkshire and Humberside, *Transactions of the Institute of British Geographers, New Series* **20** (1): 58-67.
19. *Microsoft Excel VBA Professional Projects* (2003). Birnbaum D., Course Technology PTR
20. *Microsoft® Excel 2000 Bible* (2000). Walkenbach J., Wiley
21. Murdoch J. C., Sandler T., Sargent K. (1997). A Tale of Two Collectives: Sulphur versus Nitrogen Oxides Emission Reduction in Europe, *Economica, New Series* **64** (254): 281-301.
22. Muschett F. D. (1981). Spatial Distributions of Urban Atmospheric Particulate Concentrations, *Annals of the Association of American Geographers* **71** (4): 552-565.
23. *GIS and Public Data* (2004). Ralston B., OnWord Press, 230 p.
24. Smith R. I., Fowler D., Cape J. N. (1989). The Statistics of Phytotoxic Air Pollutants, *Journal of the Royal Statistical Society. Series A (Statistics in Society)* **152** (2): 183-198.
25. Smith J., French S. (1993). Bayesian Updating of Atmospheric Dispersion Models for Use After an Accidental Release of Radioactivity, *The Statistician: Special Issue: Conference on Practical Bayesian Statistics* **42** (5): 501-511.
26. Sofiev M. (2002) Extended resistance analogy for construction of the vertical diffusion scheme for dispersion models. *J. of Geophys. Research – Atmosphere*, **107**, D12, doi: 10.1029/2001JD001233.
27. Sofiev M. (2000) A model for the evaluation of long-term airborne pollution transport at regional and continental scales. *Atmospheric Environment*. **34**, No.15, pp. 2481-2493.

28. Sofiev M. (1999) Validation of model results on different scales. Approaches to scaling of trace gas fluxes in ecosystems, ed. A.F.Bouwman, *Developments in Atmospheric Science*, **24**, Elsevier, 235-255.
29. Sofiev M., P. Siljamo, I. Valkama, M. Ilvonen and J. Kukkonen (2004) A dispersion modelling system SILAM and its evaluation against ETEX data. Finnish Meteorological Institute, Helsinki, Finland.
30. Taggart W. A. (1985). Air Quality Control Expenditures in the American States, *The Journal of Politics* **47** (2): 704-714.
31. Yearley S. (1999). Computer Models and the Public's Understanding of Science: A Case-Study Analysis, *Social Studies of Science* **29** (6): 845-866.
32. *GrADS Documentation*, Institute of Global Environment and Society, (<http://www.iges.org/grads/gadoc/>)
33. *List, classification and detail view of model entries*, Meteorologisches Institut, Universität Hamburg ([http://www.mi.uni-hamburg.de/List-classification-and-detail-view-of-model-entr.567.0.html?&user_cost728_pi2\[showUid\]=44](http://www.mi.uni-hamburg.de/List-classification-and-detail-view-of-model-entr.567.0.html?&user_cost728_pi2[showUid]=44))

SUMMARY

The main purpose of this diploma thesis “Particulate matter transport in the atmosphere research using SILAM model” (written by Adomas Mažeikis) is to use SILAM model to research the transport of local Particulate matter pollutants and those from neighboring countries too. Emission data was prepared by interpolating EMEP and Statistical Department provided data sets. Meteorological data was taken from Lithuanian HydroMeteorological Service HIRLAM installation.

The setup of model was prepared and test runs were made (one of them is simulating fire in oil refinery "Mažeikių nafta"). The results of this thesis are large arrays of past (2007 October - 2008 April) PM10 dispersion data. Grads package was used to perform the analysis of data and these are the conclusions made after the analysis was finished:

1. SILAM model is accurate enough for researching country wide PM10 transport analysis.
2. Each and every model run needs individual setup for best performance.
3. SILAM is not user friendly application and there is a lack of documentation (User guide, Operational instructions and model technical descriptions are available but it does not describe the setup of model in details).
4. Users of SILAM should check model run logs. There is plenty of useful data in there though the format is not very usable.
5. Performed analysis of model run results shows that the biggest part of PM10 aerosol is in the lower levels of the troposphere and that part is transported up to 100km (this can only mean that the bigger parts of aerosol are in the lower layers and the tiny ones reach higher levels so they are transported much further).
6. After performing the analysis of model results, it is obvious that the main transport of PM10 from Lithuanian emission sources goes North North East (to Latvia)
7. Model results show that a lot of PM10 comes from neighbor country Poland (there are quite high emission levels from coal pools and metallurgical plants).
8. The biggest part of PM10 from Poland reaches only Southwest part of Lithuania, but the pollutants from the higher levels can be transported practically to all country.

9. Maximal concentration levels of PM10 in the atmosphere level up to 25 meters are up to 10 times higher than the average levels, but it is still just the half of maximal concentration when the PM10 is transported from Poland.

10. Main part of PM10 emitted by lithuanian sources is not transported to other countries. It falls out in the ways of wet and dry deposition. Moreover, bigger part of pollutants that come from Poland falls out in Lithuania too.

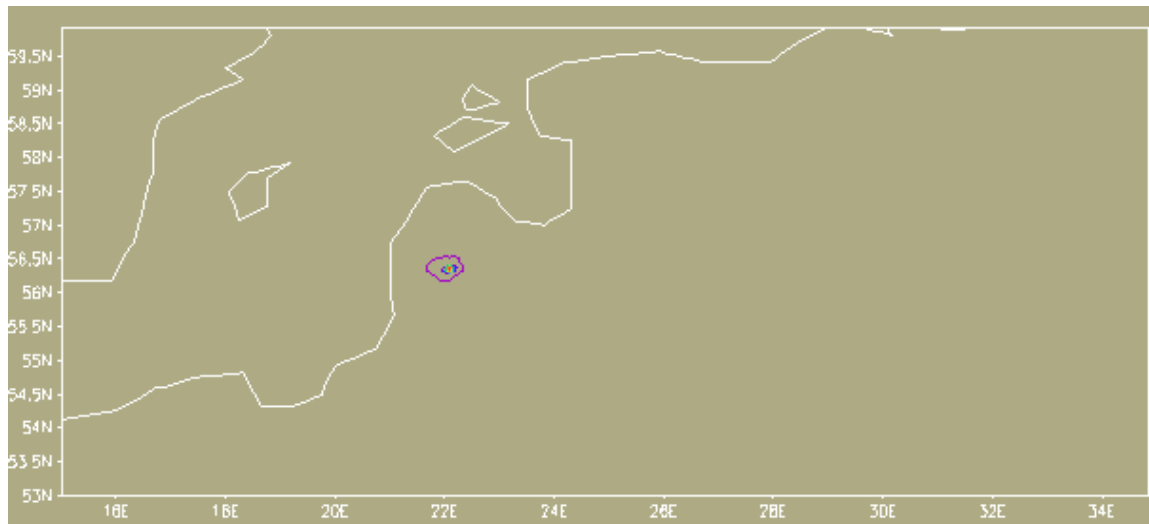
11. While analyzing the results of model, some specific situations were observed. All of them can be classified using three main classes of situations: PM10 concentration is very low over all Lithuania (because of meteorological conditions); the concentration of PM10 can rise sharply in some areas up to 10 times because of meteorological conditions (though the emission rate stays the same); if the meteorological conditions allow the bigger part (even bigger than the local one) pollutants can be transported from neighboring countries (especially Poland).

The recommendations for scientists who are going to use SILAM is to evaluate the time needed for the tasks. Everything goes very well (the data formats ar specific but easy to understand, the setup can be arranged after making some mistakes), but using SILAM takes a lot of time. Because of the long time needed for calculations the main risk is that just before ending the model run it can crash and everything is needs to be started from the begining

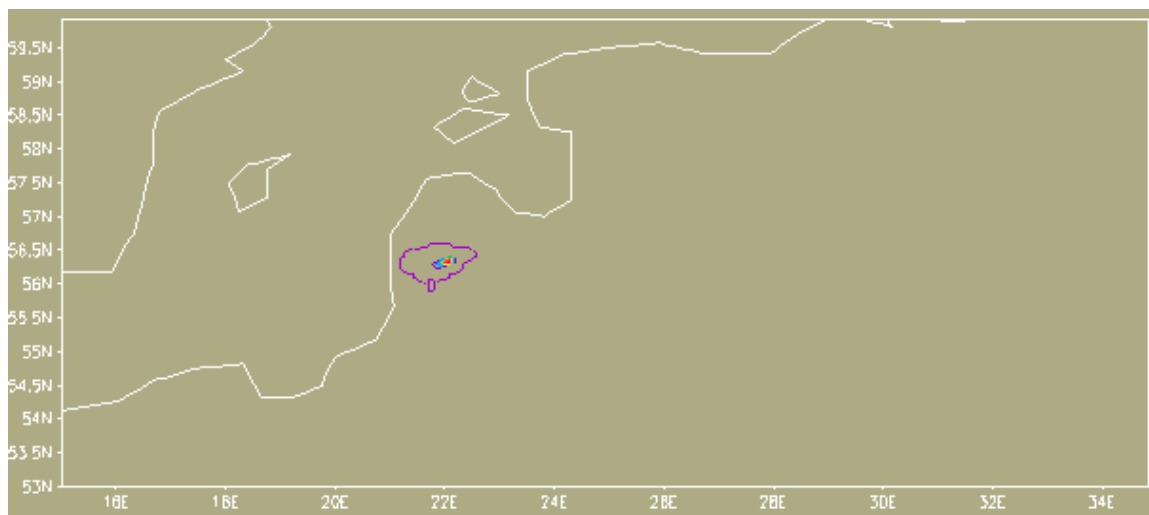
Priedai

Priedas nr. 1 (SILAM dispersijos modelio rezultatai simuliuojant AB „Mažeikių nafta“ gaisrą)

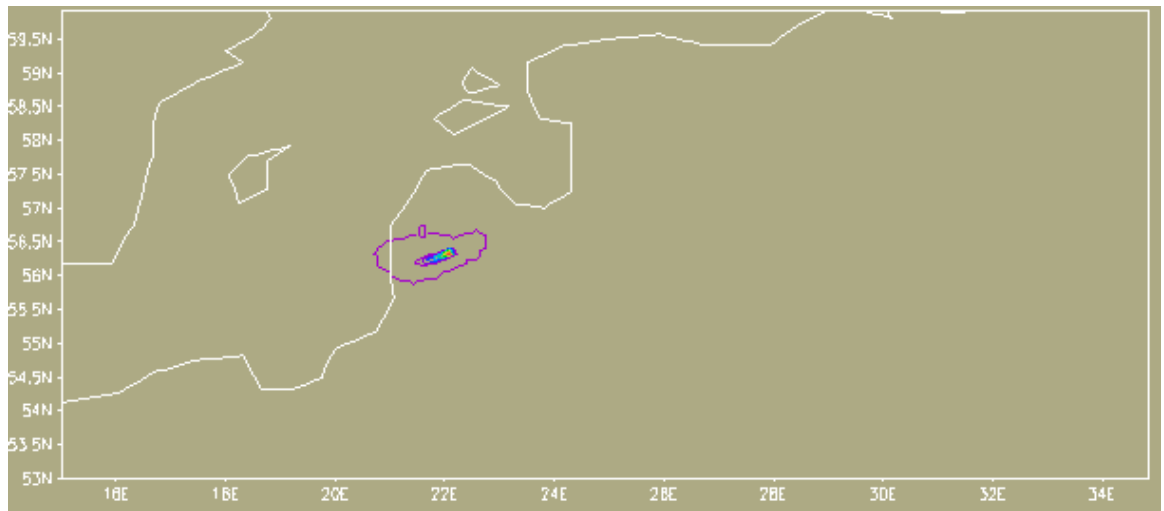
2006-10-12 15:00



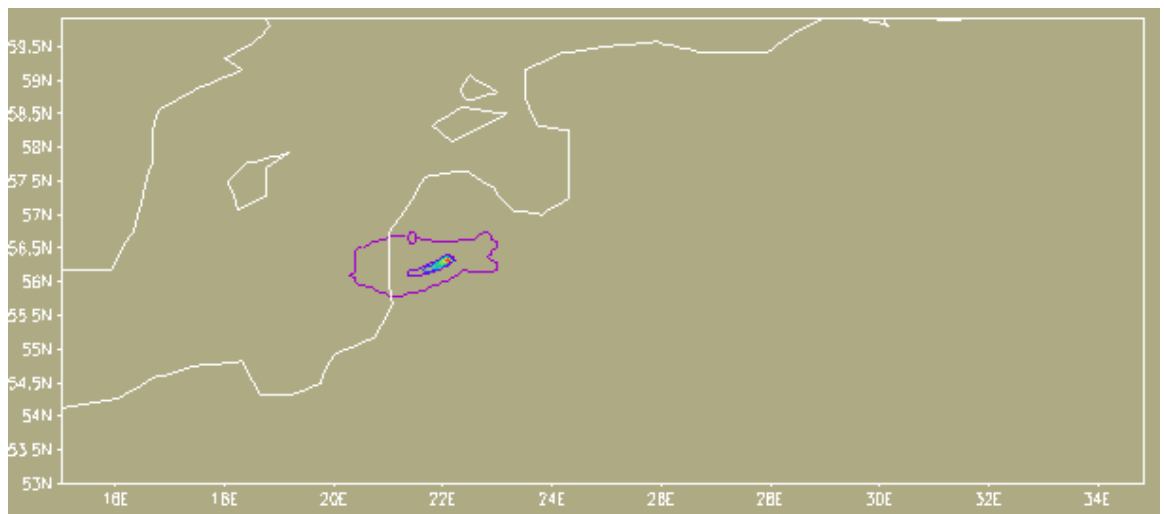
2006-10-12 16:00



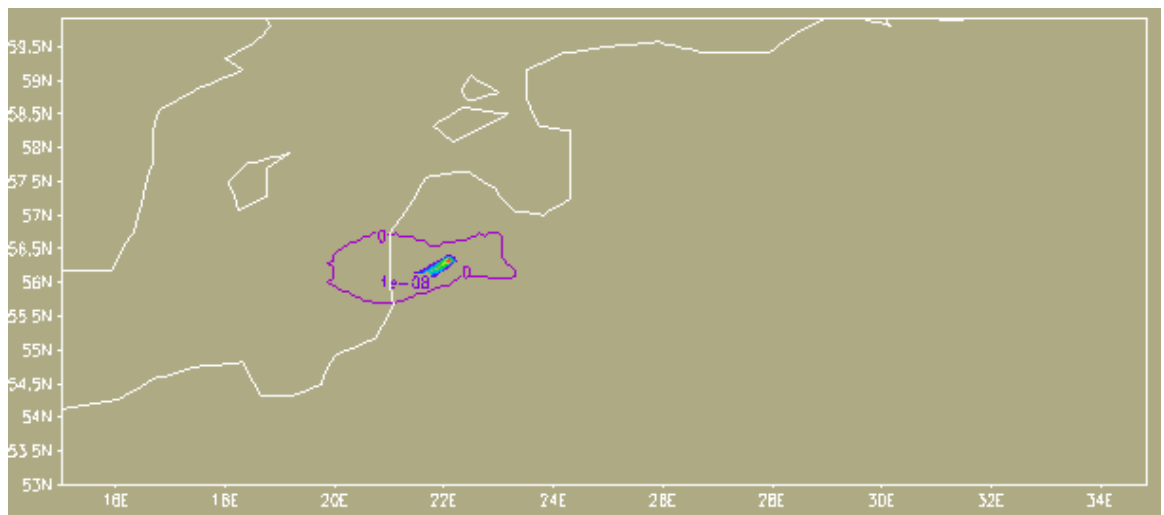
2006-10-12 17:00



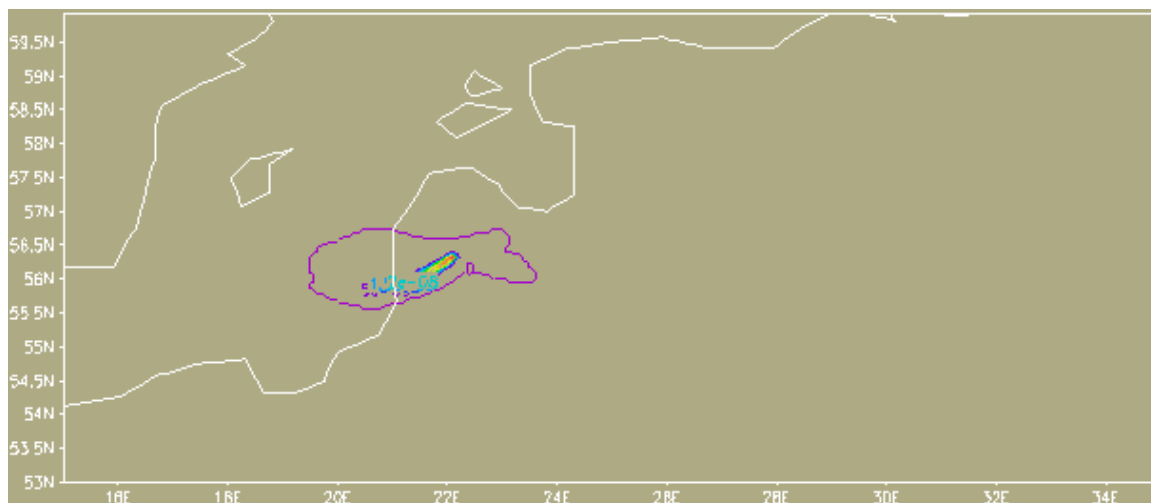
2006-10-12 18:00



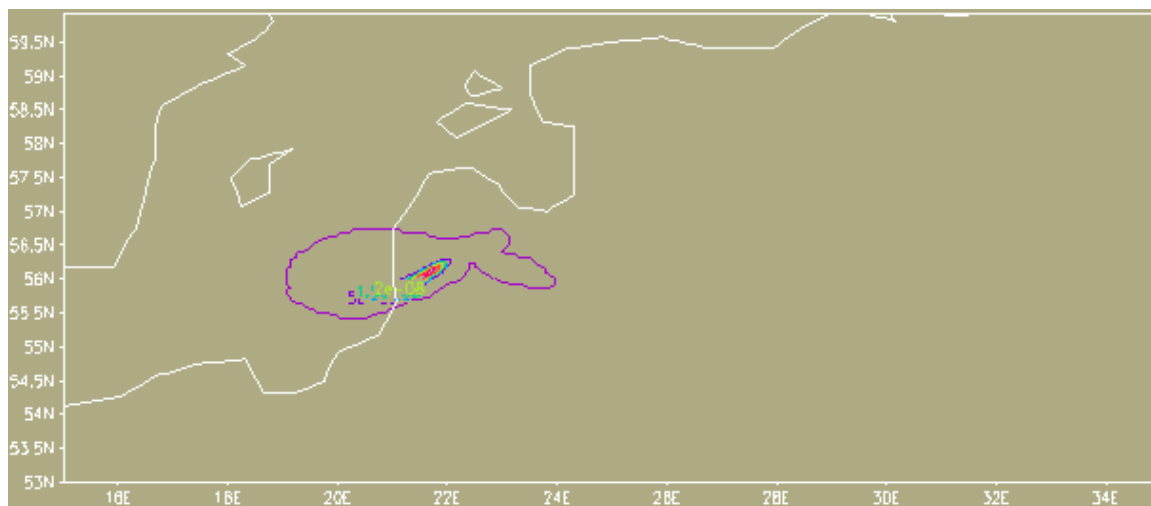
2006-10-12 19:00



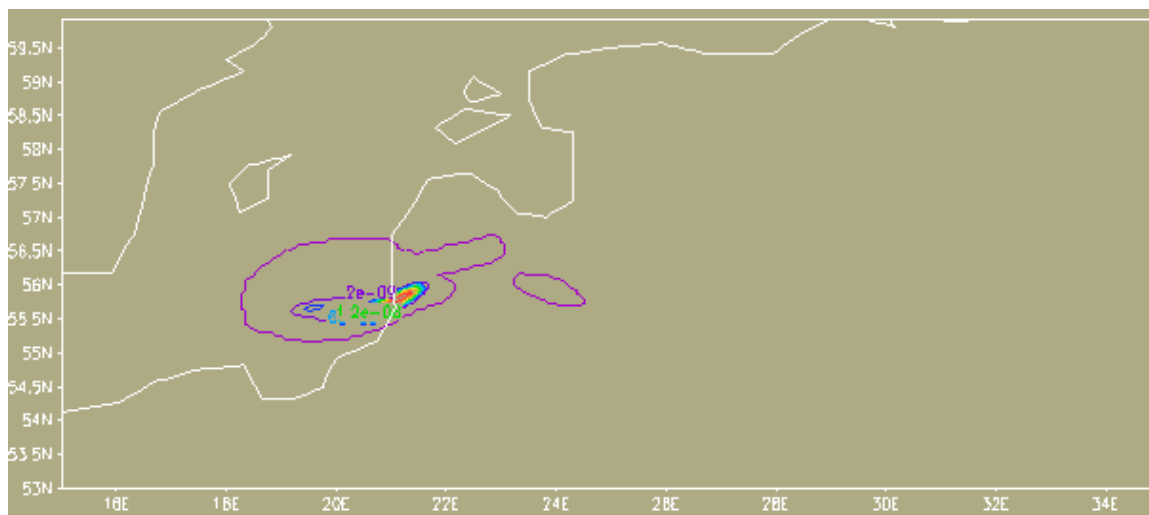
2006-10-12 20:00



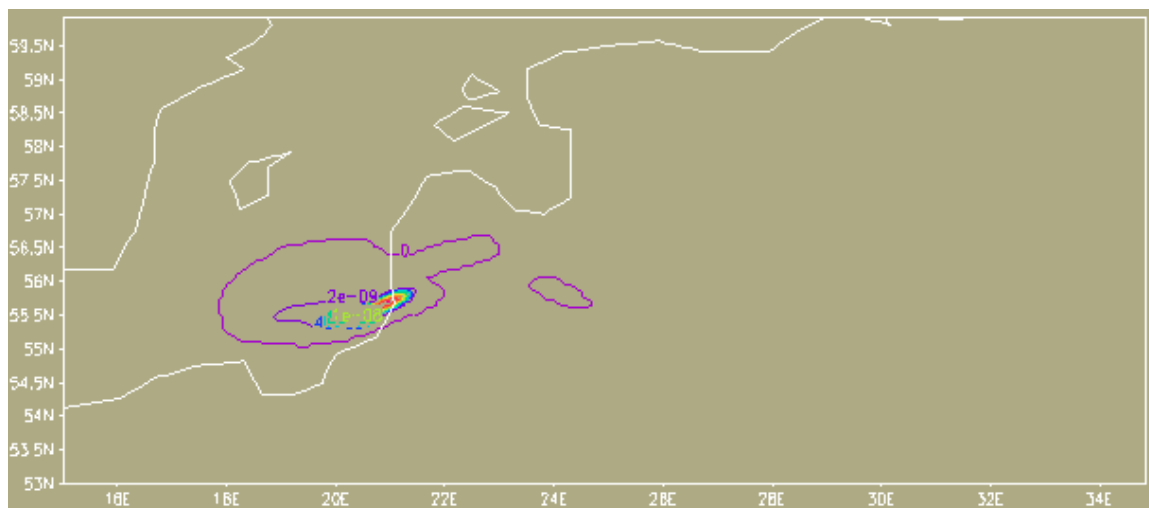
2006-10-12 21:00



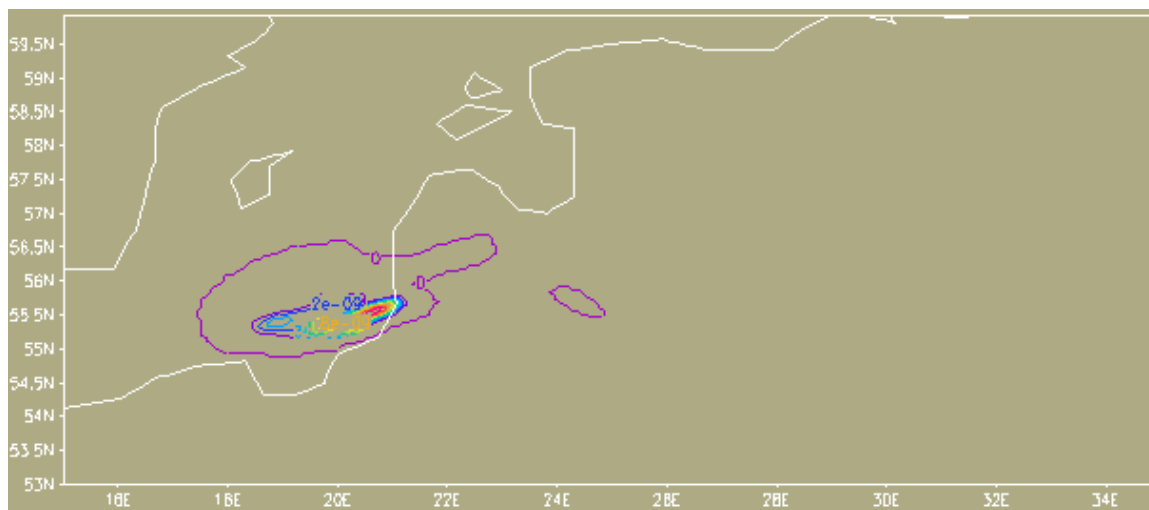
2006-10-12 23:00



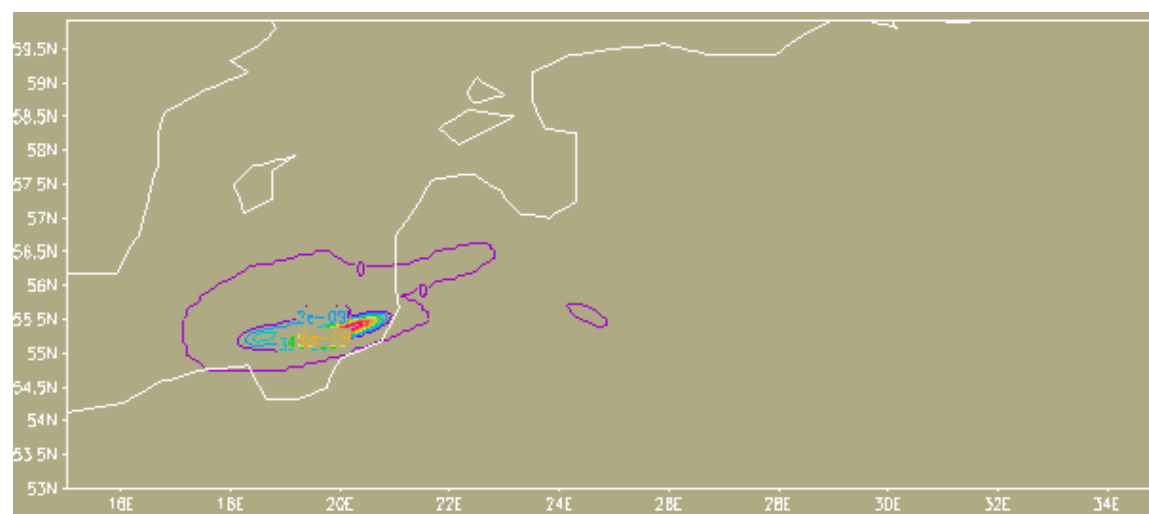
2006-10-13 00:00



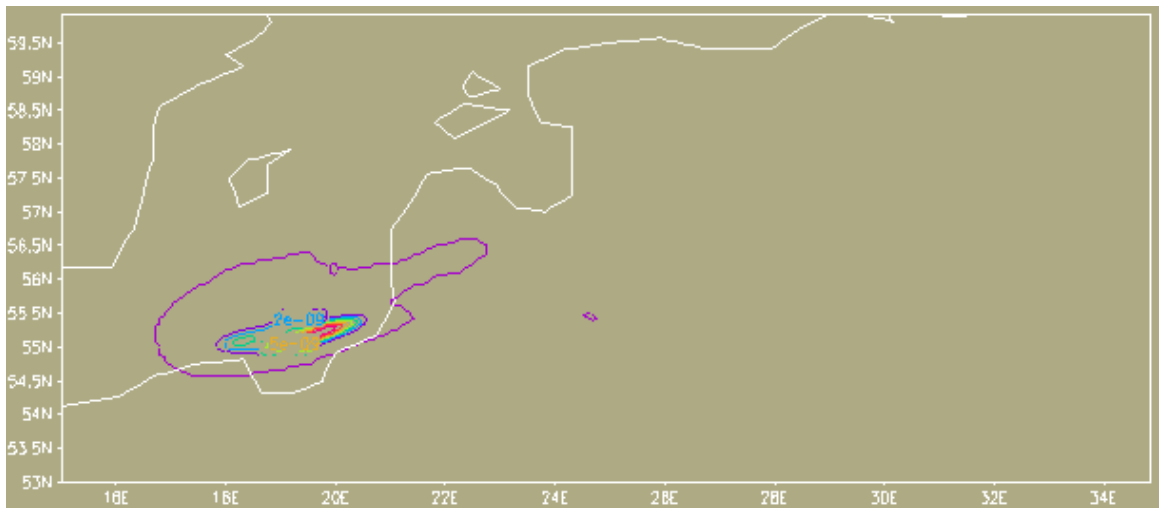
2006-10-13 01:00



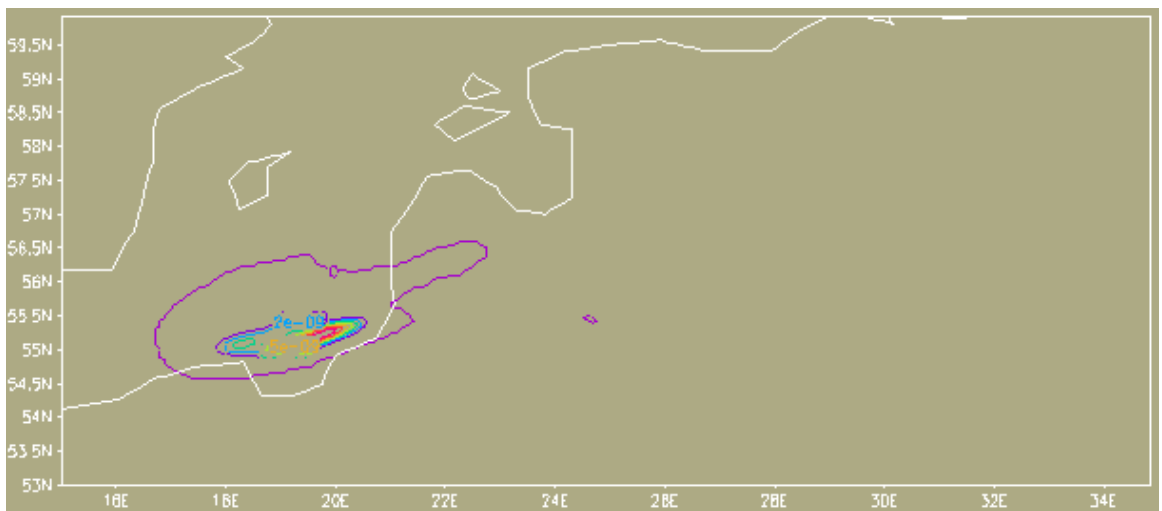
2006-10-13 02:00



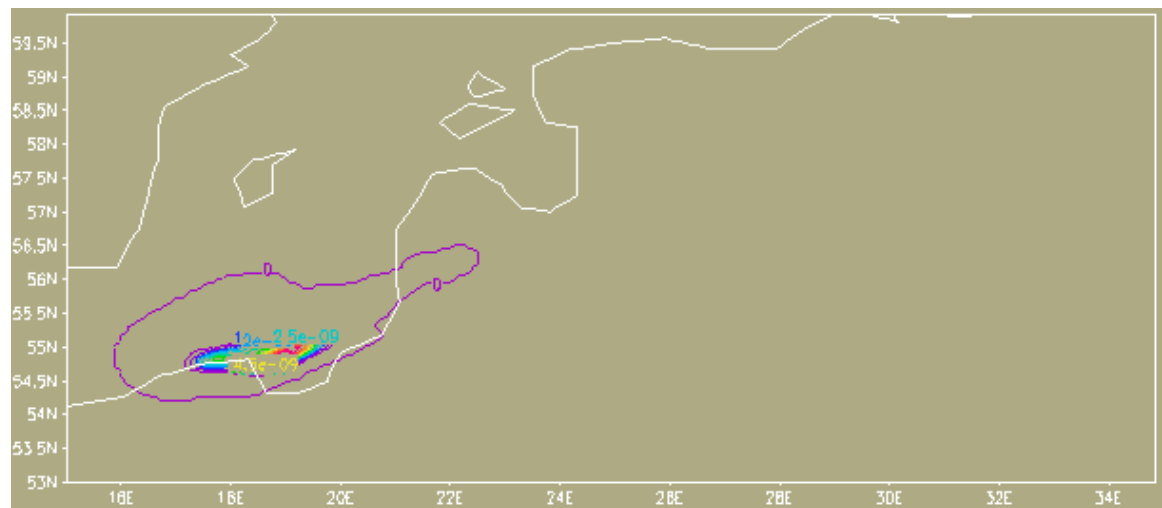
2006-10-13 03:00



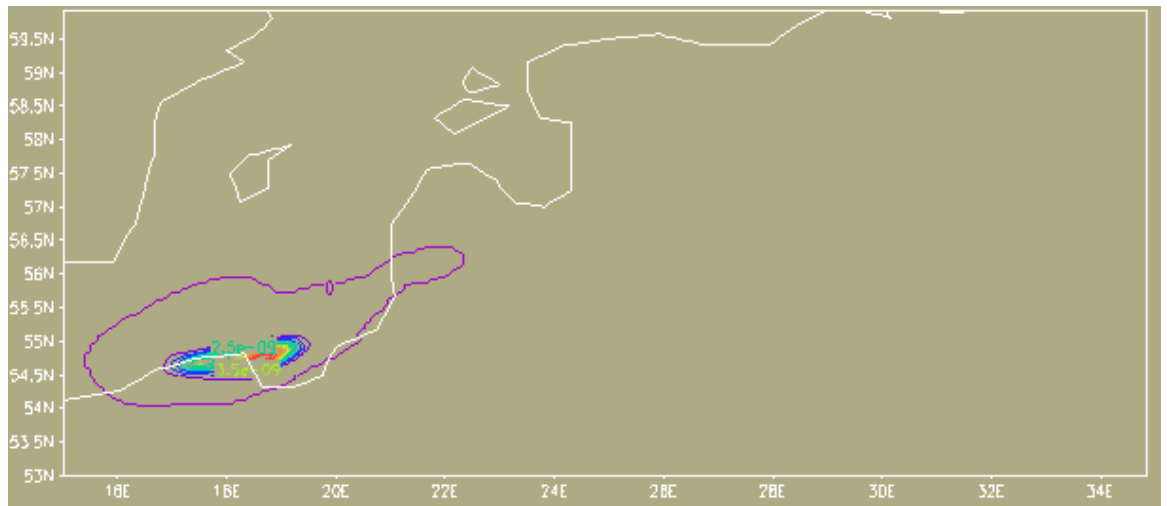
2006-10-13 04:00



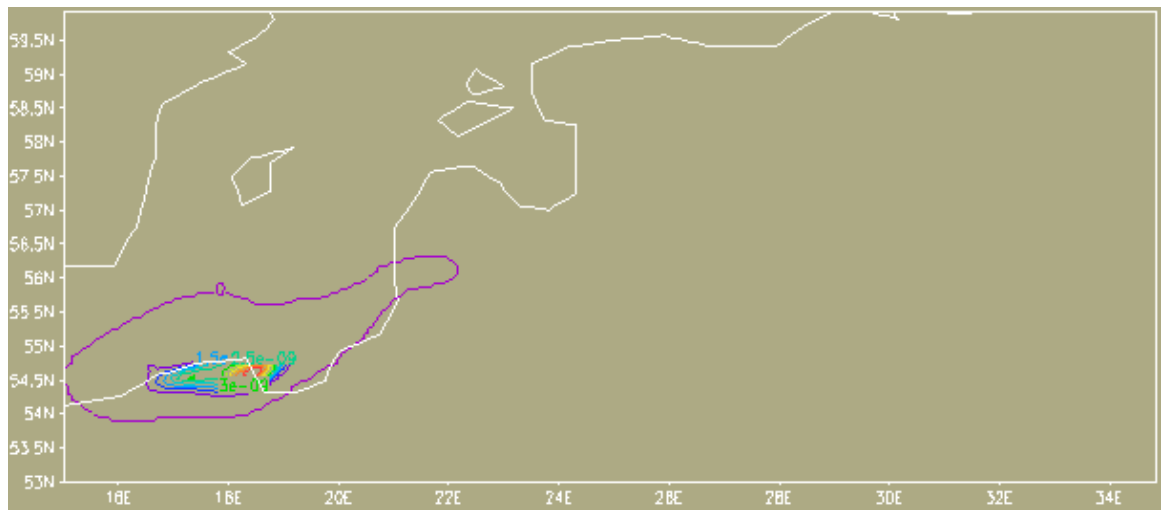
2006-10-13 05:00



2006-10-13 06:00

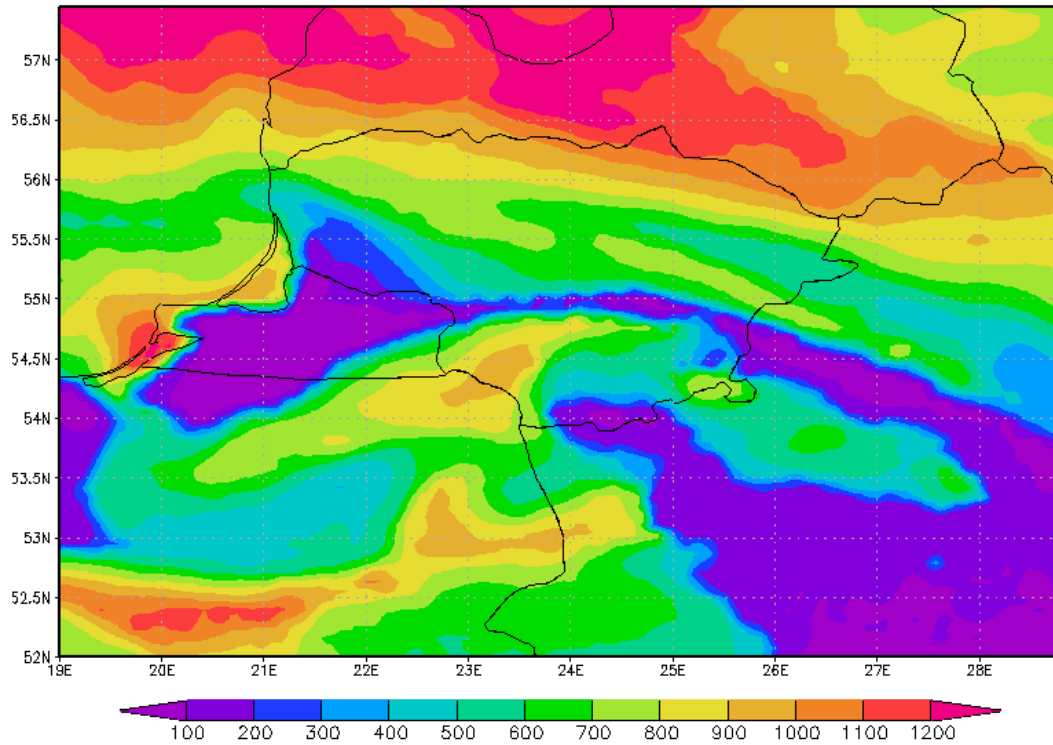


2006-10-13 07:00

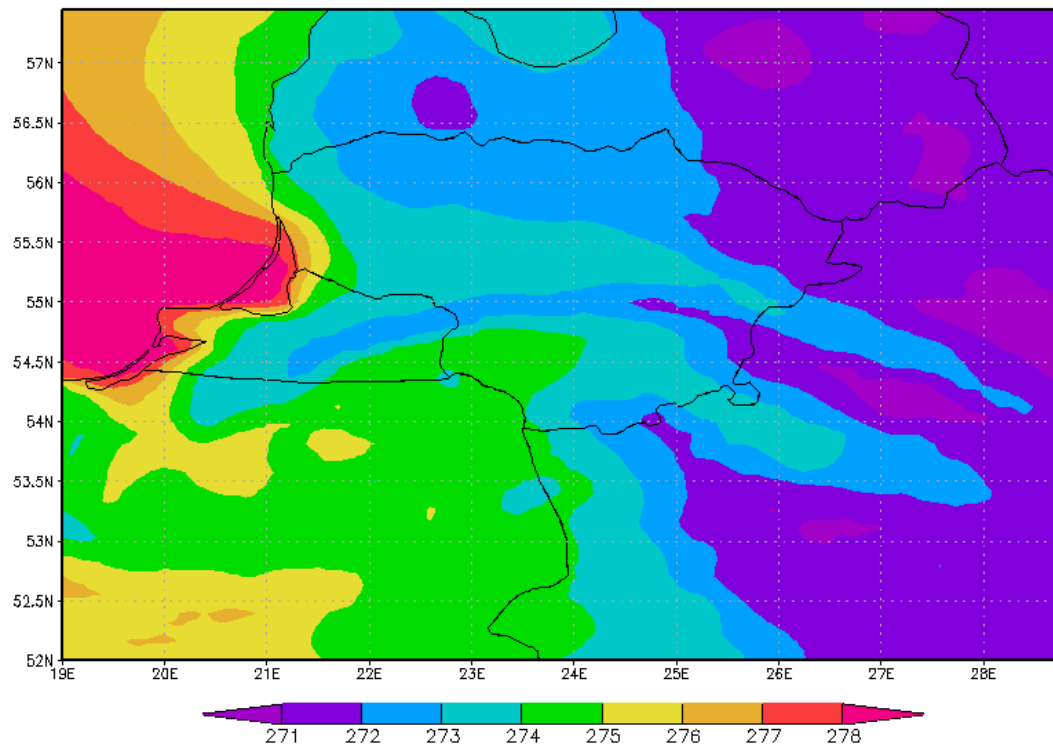


Priedas nr. 2 (2007 lapkričio mėn. 12d. 21:00 išskirtinio KD10 pernašos atveju meteorologiniai duomenys)

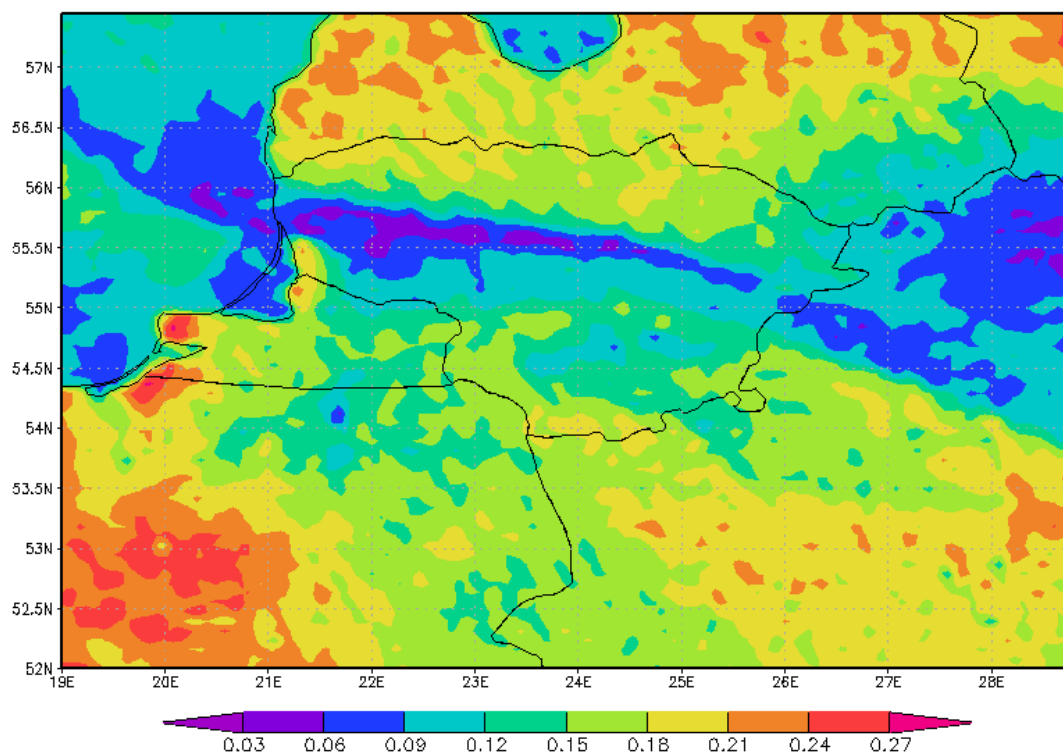
Atmosferos paribio sluoksnio aukštis (m)



Oro temperatūra 2m aukštyje (K)

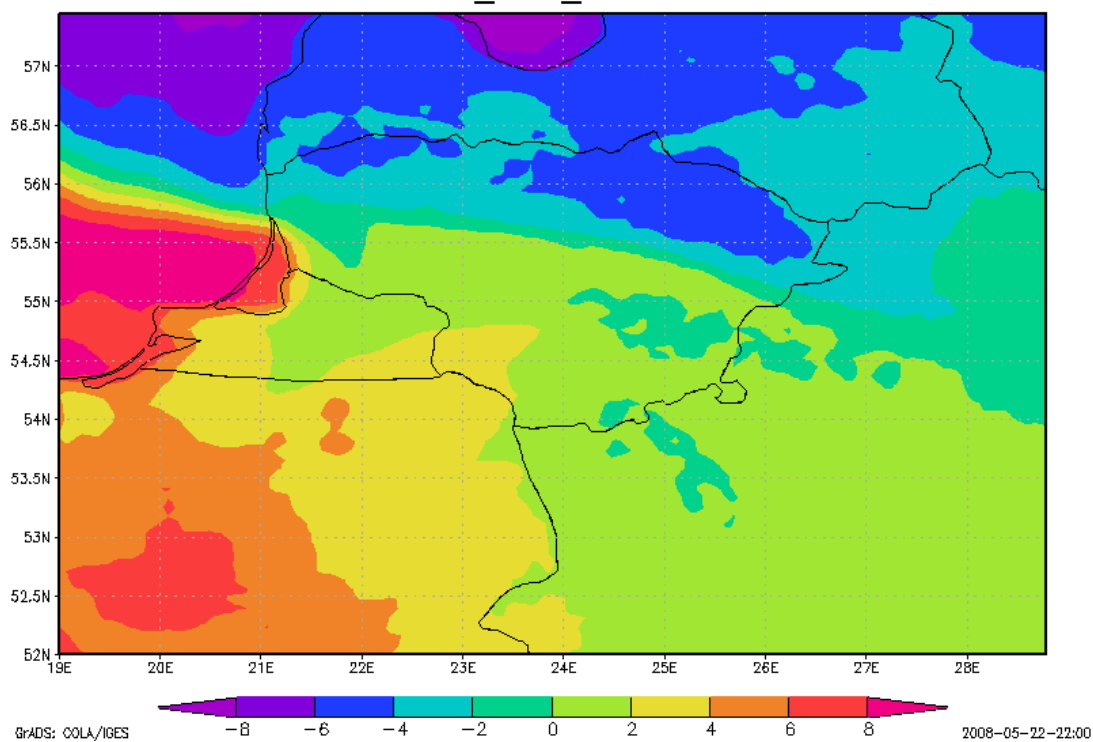


Turbulencija (Kz)



Zoninė vėjo komponentė 10m aukštyje (m/s)

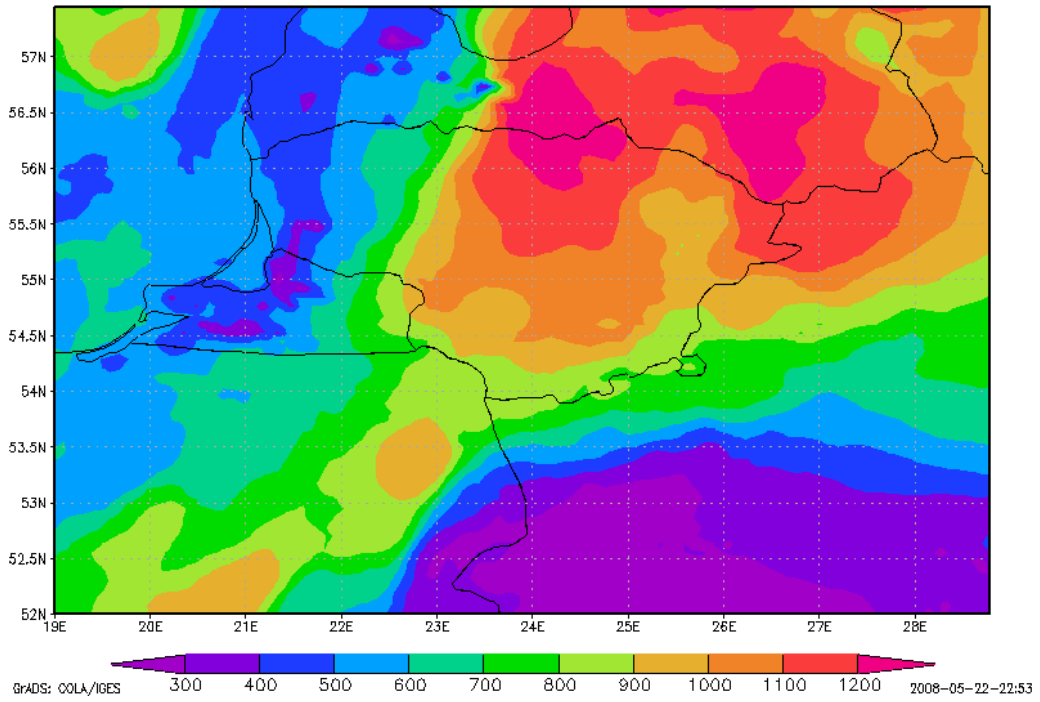
U_wind_10m



Priedas nr. 3 (2007 lapkričio mėn. 25d. 12:00 išskirtinio KD10 pernašos atveju meteorologiniai duomenys ir aukštesnių troposferos lygių KD10 koncentracijos duomenys)

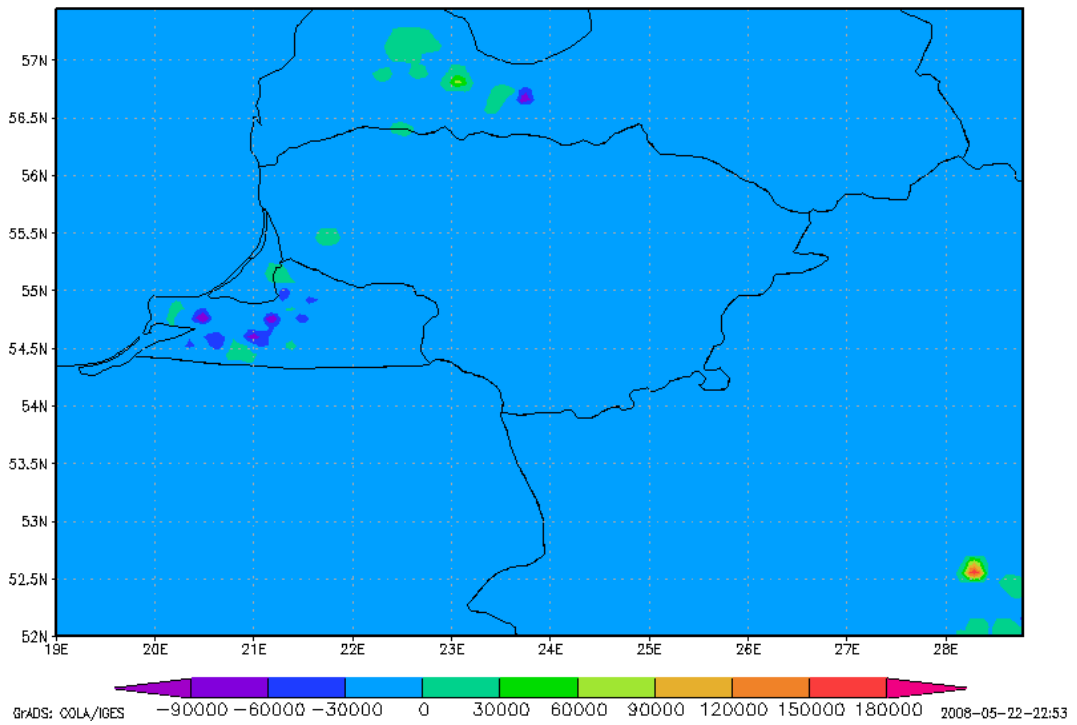
Atmosferos paribio sluoksnio aukštis (m)

BLH



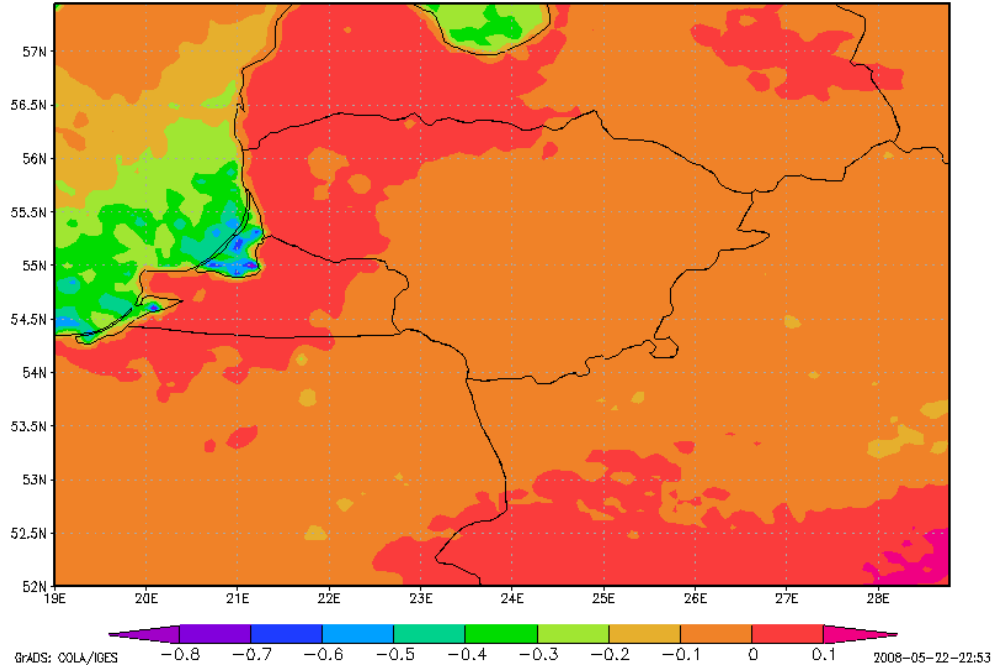
Monin-Obukhov ilgis (m)

Monin_Obukhov_I



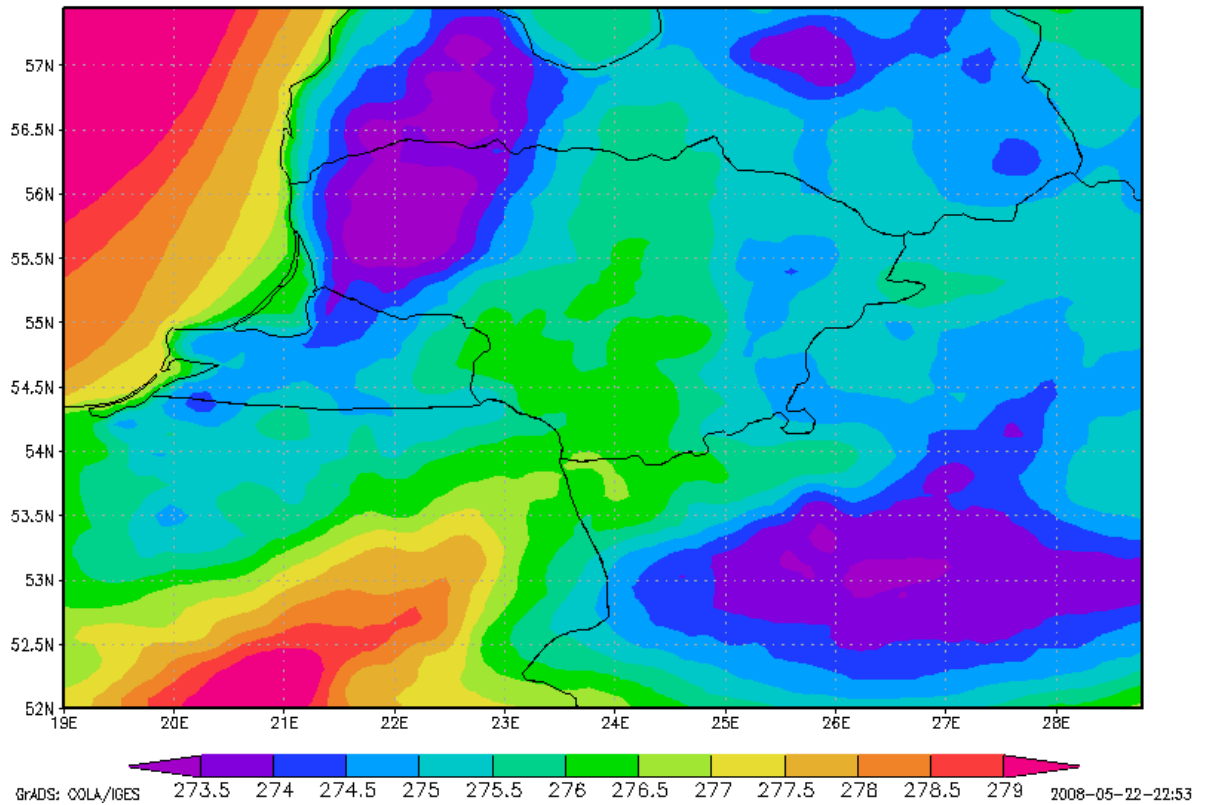
Ričardsono skaičius

Richardson_nbr

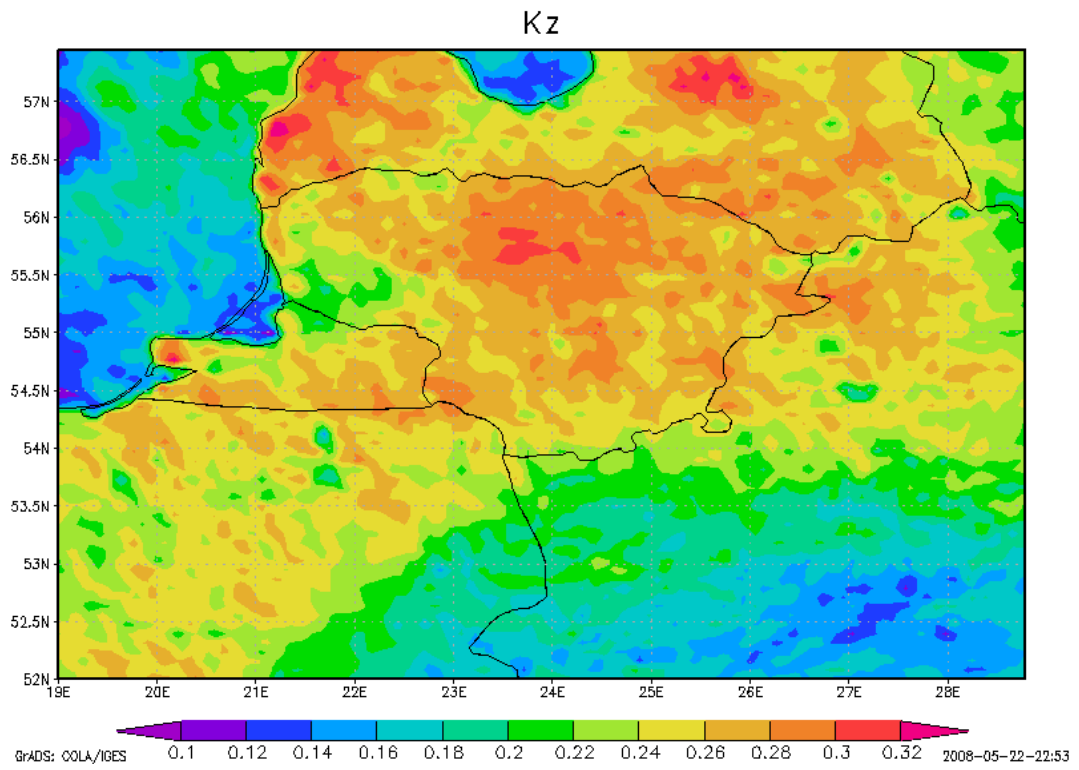


Oro temperatūra 2m aukštyje (K)

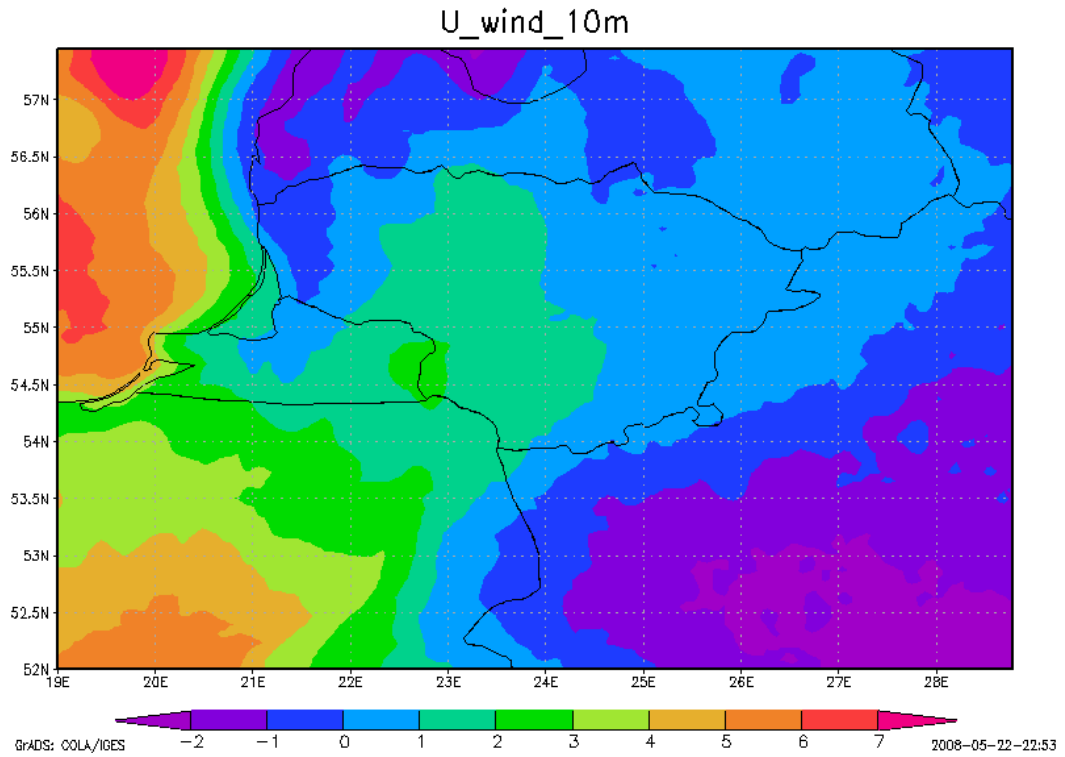
temp_2m



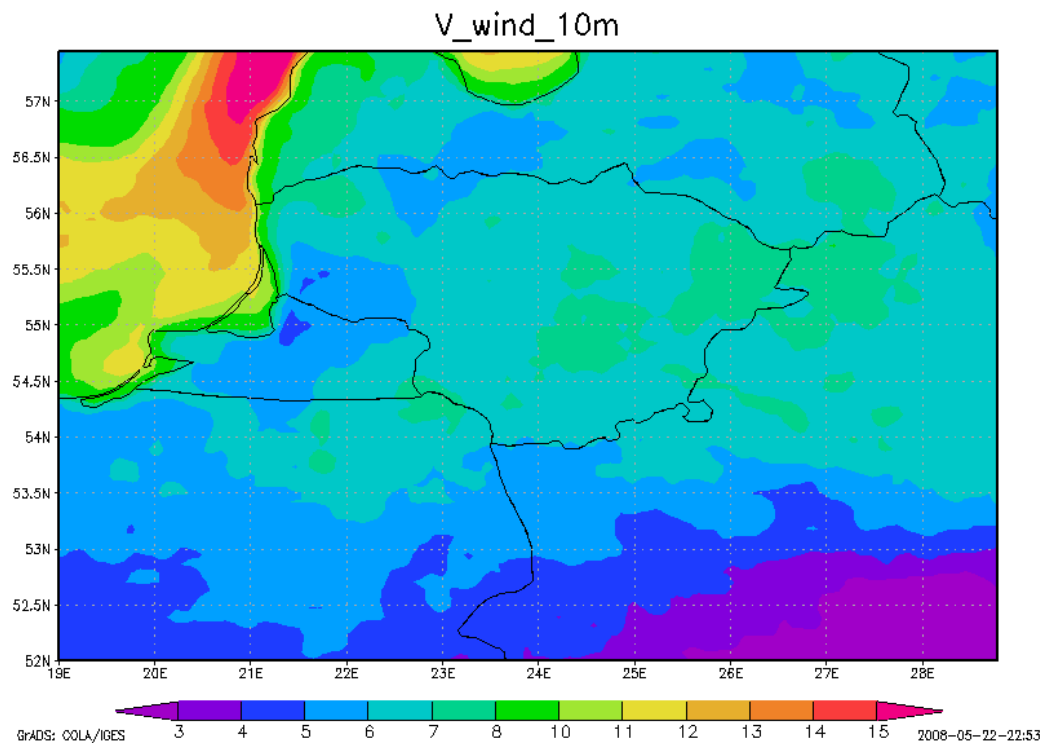
Turbulentiškumas (Kz)



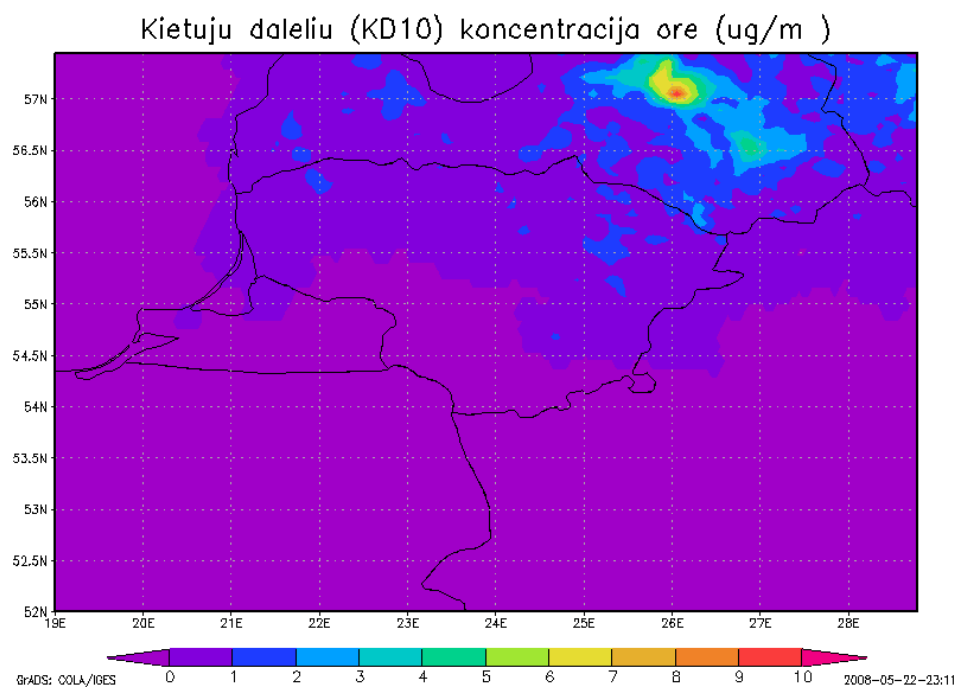
Zoninio vėjo komponentė (m/s)



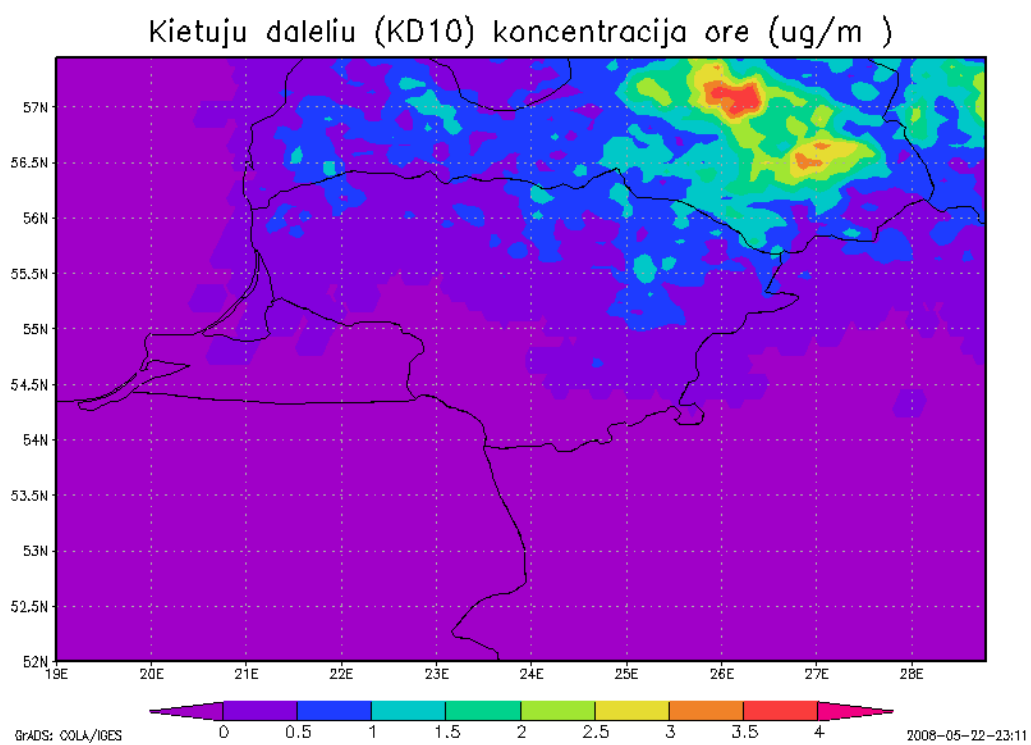
Meridianinio vėjo komponentė



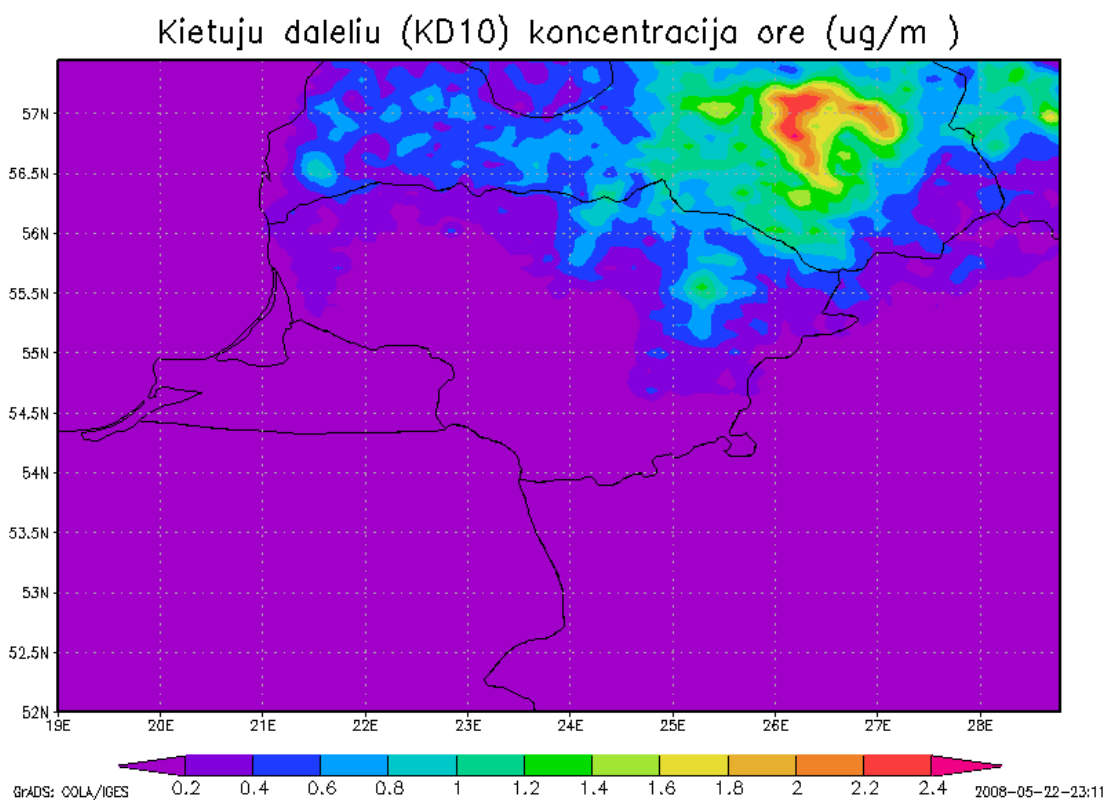
Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 25-100m sluoksnyje



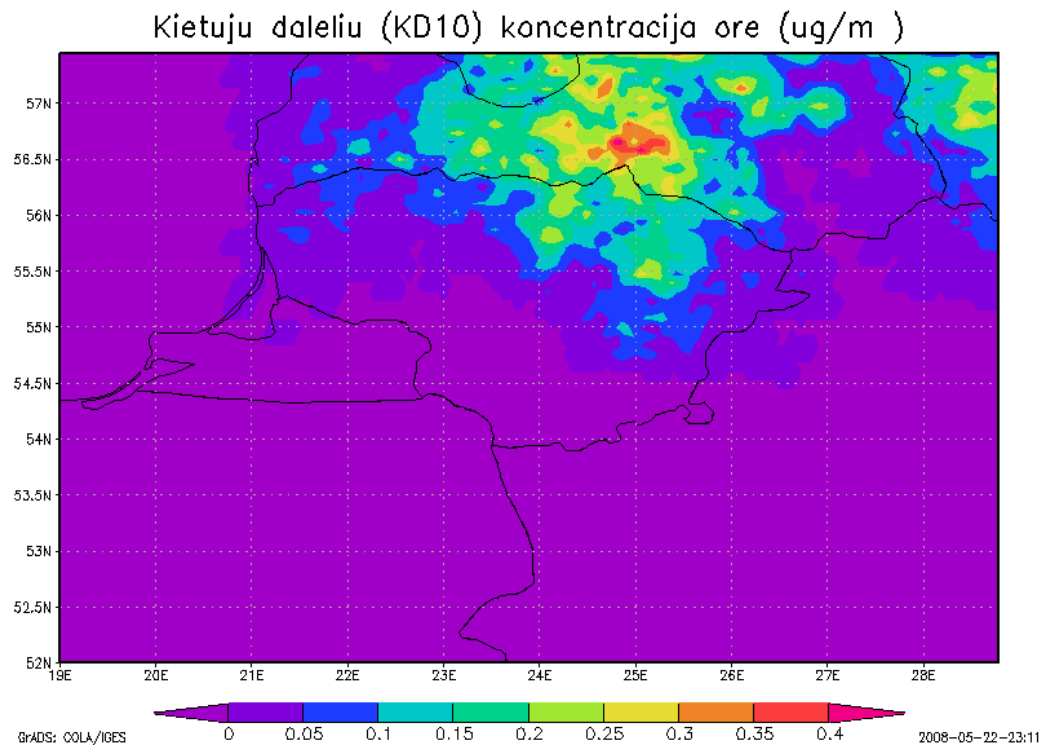
Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 100-200m sluoksnyje



Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 200-600m sluoksnyje

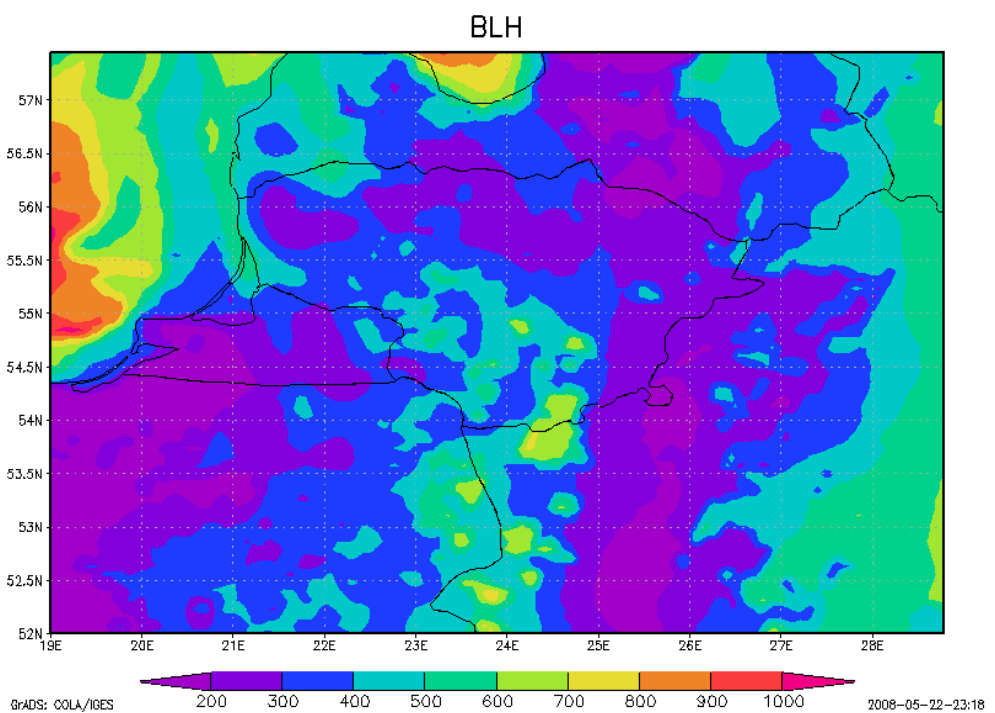


Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 600-1350m sluoksnyje

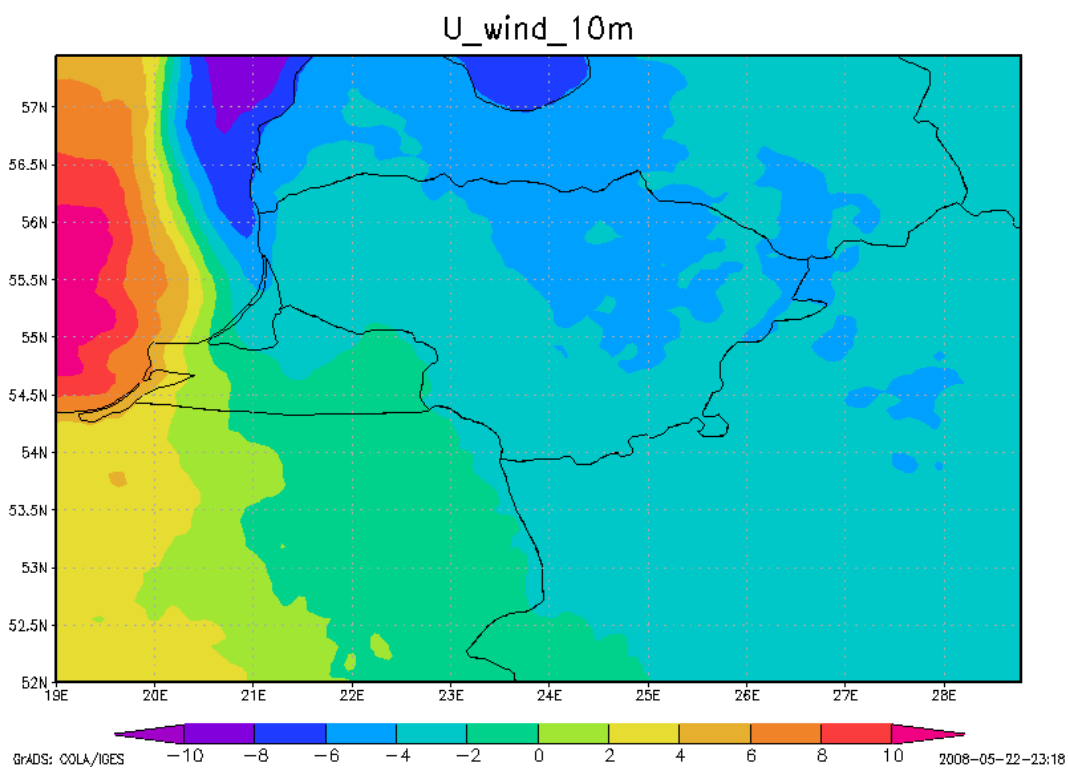


Priedas nr. 4 (2007 lapkričio mėn. 7d. 18:00 išskirtinio KD10 pernašos atvejo meteorologiniai duomenys ir aukštesnių troposferos lygių KD10 koncentracijos duomenys)

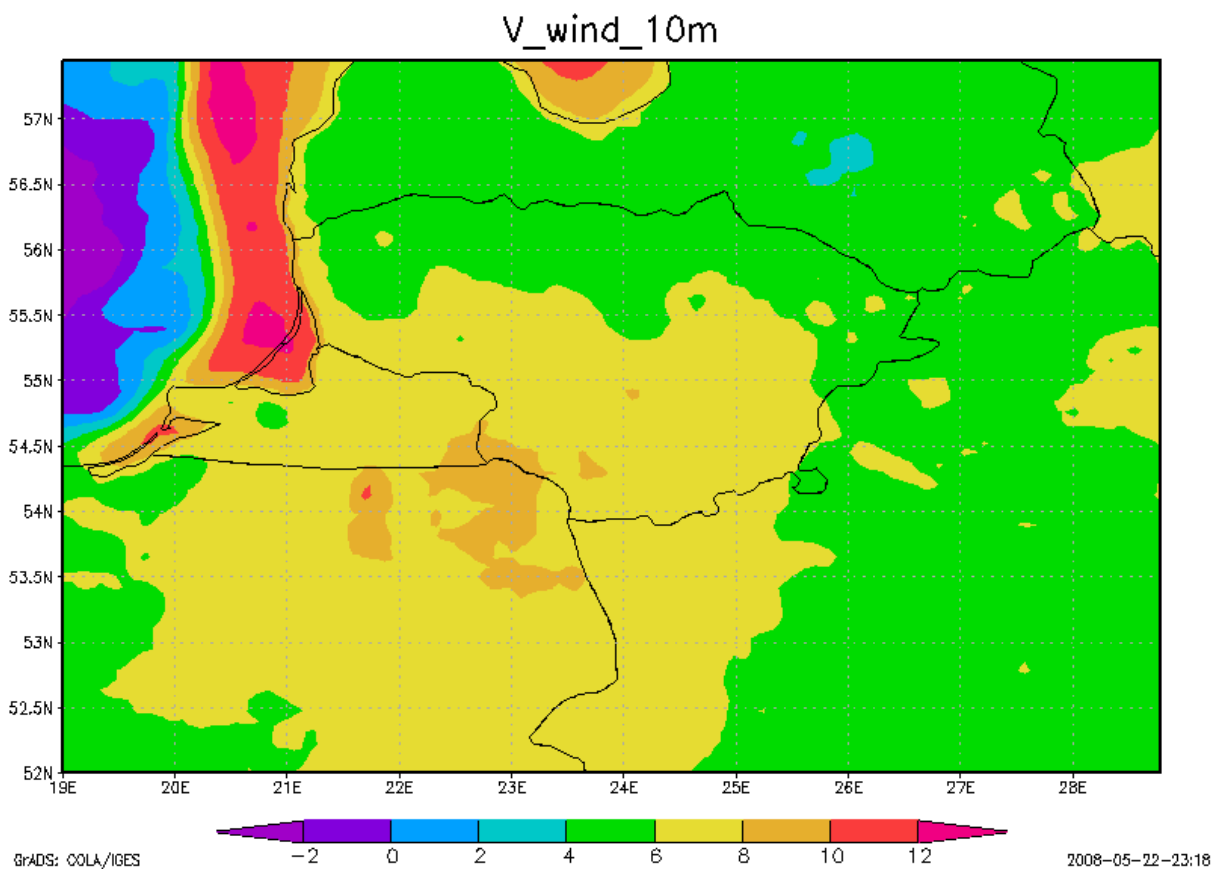
Atmosferos paribio sluoksnio aukštis (m)



Zoninio vėjo komponentė (m/s)

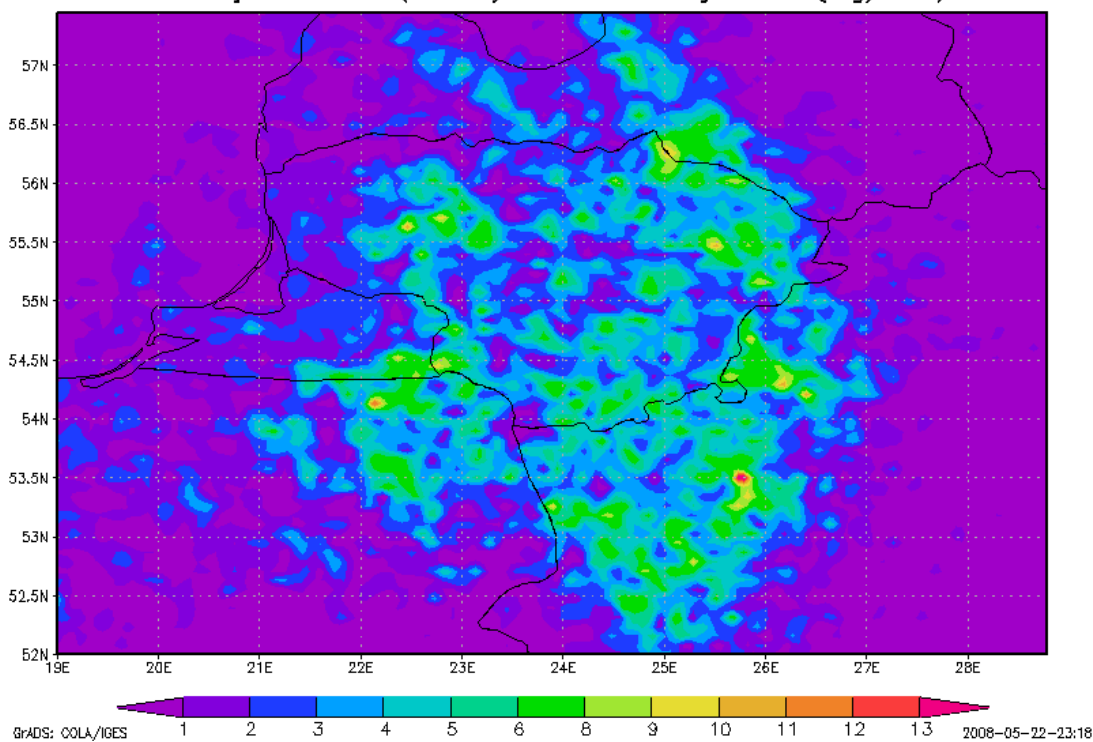


Meridianinio vėjo komponentė



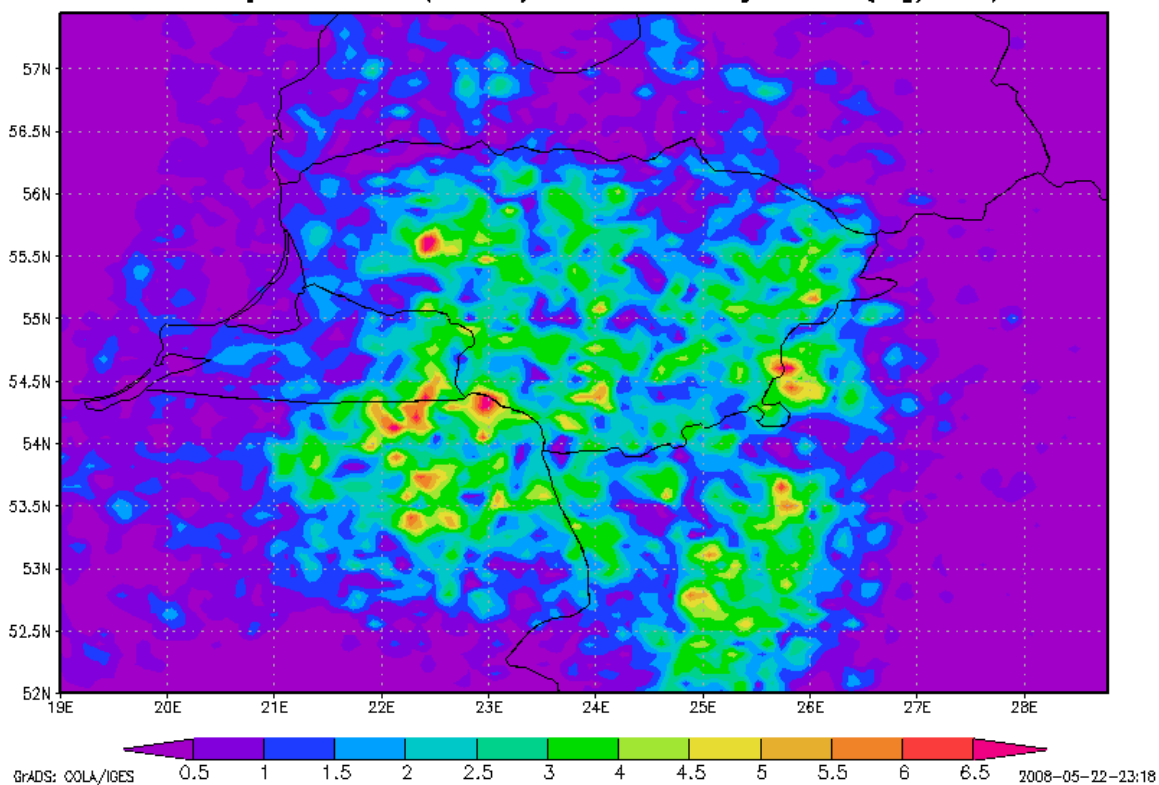
Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 25-100m sluoksnyje

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



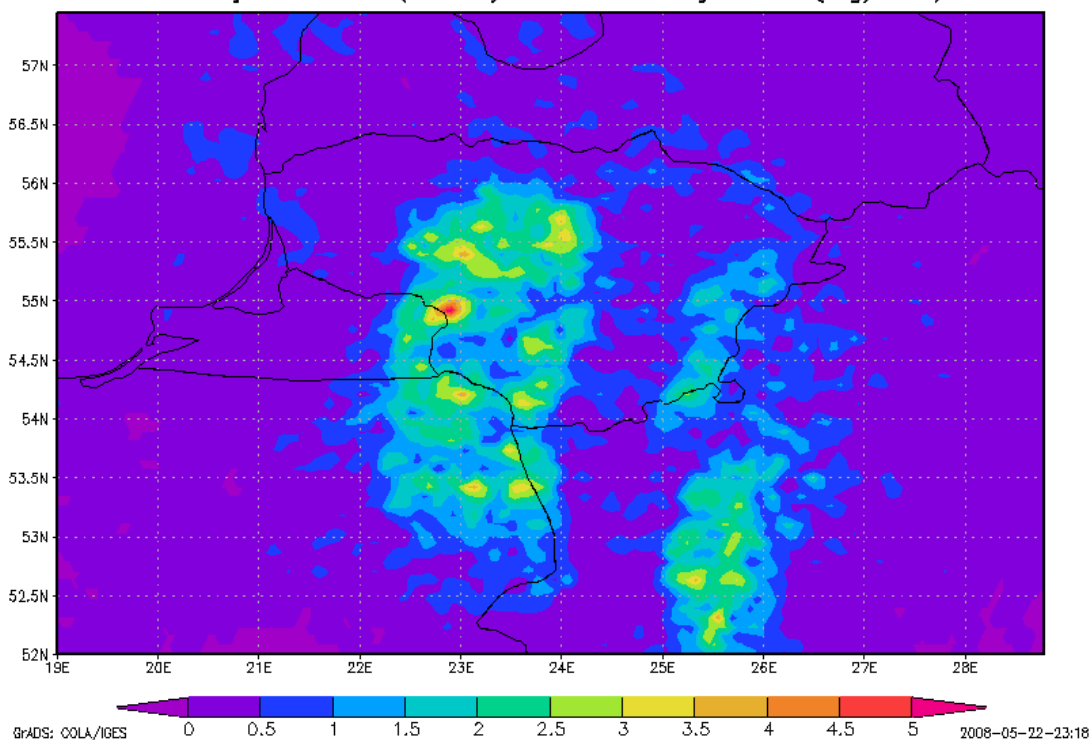
Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 100-200m sluoksnyje

Kietuju daleliu (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 200-600m sluoksnyje

Kietųjų dalelių (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)



Pirminių KD10 koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 600-1350m sluoksnyje

Kietųjų dalelių (KD10) koncentracija ore ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)

