

RePLaT–Chaos

A légköri szennyeződésterjedés kaotikus vonásainak szemléltetésére

Elméleti háttér és felhasználói dokumentáció

Haszpra Tímea

ELTE TTK Elméleti Fizikai Tanszék
MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

Budapest, 2018

Tartalomjegyzék

1. BEVEZETÉS	3
2. FELHASZNÁLÓI DOKUMENTÁCIÓ	3
2.1. A PROGRAM RÖVID ISMERTETÉSE	3
2.2. A PROGRAM INDÍTÁSA	4
2.3. METEOROLÓGIAI ADATOK	4
2.4. KIMENŐ ADATOK	4
2.5. SZIMULÁCIÓ INDÍTÁSA	5
2.5.1. A szimuláció paramétereinek beállítása	5
2.5.2. A szennyeződéshő paramétereinek megadása	7
2.5.3. A szennyeződéshő részecskéinek beolvasása	8
2.5.4. A szimuláció elindítása	9
2.5.5. Szimuláció alatti megjelenítés beállításai	9
2.6. MENTETT SZIMULÁCIÓ LEJÁTSZÁSA	10
3. ELMÉLETI HÁTTÉR	13
3.1. A RÉSZECSKÉK MOZGÁSÁNAK MEGHATÁROZÁSA	13
3.2. TOPOLOGIKUS ENTRÓPIA	15
3.3. SZÖKÉSI RÁTA	16
KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS	17
HIVATKOZÁSOK	17

1. Bevezetés

A RePLaT-Chaos program segítségével egyszerűen szimulálható aeroszol részecskékből vagy gázokból álló szennyeződéshők globális skálájú légköri terjedése, illetve tanulmányozhatók vele a terjedés úgynevezett kaotikus vonásai. A program a korábban kifejlesztett RePLaT (Real Particle Lagrangian Trajectory) modell [1, 2] egyszerűsített változata. A program a légköri áramlások általi szállítódást és a részecskékre ható nehézségi erőt figyelembe véve határozza meg a részecskék mozgását.¹

Háromdimenziós áramlásokban, így a légkörben is, megjelenik a szennyeződések terjedésének kaotikussága [3]. A terjedés során jól megfigyelhetők a kaotikus viselkedés jellemző jelei, úgymint a kezdeti feltételekre való érzékenység (a közeli részecskék pályái kis idő elteltével gyorsan távolodnak egymástól), az időben szabálytalan mozgás és a szálas, bonyolult, de egyben rendezett geometriai megjelenés. A program segítségével könnyen látható, hogy a kibocsátott szennyeződések a légkörben nem „tintapacaserűen” oszlanak el, hanem a fentieknek megfelelően az idő folyamán egyre jobban megnyúlva, összegyűrődve, az áramlások hatására bonyolult, tekervényes „fonalak” formájában terjednek szét. A program lehetőséget ad a szimulált terjedési események kaotikusságát leíró két mérőszámnak, a topologikus entrópiának és a szökési rátának a számítására és a szennyeződéshők sodródási képeivel való összevetésére. A topologikus entrópiával a szennyeződéshők hosszának exponenciális ütemű megnyúlása, míg a szökési rátával a részecskék légkörből való kiülepedésének üteme számszerűsíthető [3].

2. Felhasználói dokumentáció

2.1. A program rövid ismertetése

A RePLaT-Chaos programmal különböző szennyeződéshők légköri terjedése szimulálható a felhasználó által megadott időintervallumban, többféle szimulációs beállítási lehetőség mellett. A szennyeződéshőt a felhasználó által megadott számú részecske testesíti meg. A részecskék terjedésének számításához a megadott időszakot felölelő, megfelelő meteorológiai adatokat tartalmazó fájlok szükségesek. A szennyeződéshő (és részecskéinek) kezdeti pozíciója, mérete, egyéb tulajdonságai meg is adhatók, illetve fájlból már „előállított” szennyeződéshők részecskéinek adatai be is olvashatók a szimulációhoz. A program a terjedés szimulációja során minden egyes időlépésben a meteorológiai adatok alapján kiszámítja a szennyeződéshő részecskéinek új helyét, és a felhasználó által megadott időpontokban az adatokat fájlba is kiírja. A program emellett meghatározza a szennyeződéshő hosszát és a légkörből még nem távozott részecskék arányát. Ezek két, a terjedés kaotikusságát leíró mennyiségnek, a szennyeződéshők nyúlási ütemét jellemző topologikus entrópiának, valamint a részecskék kiülepedésének gyorsaságát leíró szökési ráta meghatározásához szükségesek. A program lehetőséget nyújt fájlba mentett szimulációk visszajátszására, és az említett két, kaotikus viselkedést számszerűsítő mennyiség meghatározására is.

¹ Egyéb folyamatok, mint például a turbulens diffúzió vagy a szennyeződések csapadék általi kimosódásának hatását elhanyagolva.

2.2. A program indítása

A programot az operációs rendszertől függően többféle módon, a <http://hatimi.web.elte.hu/RePLaT/index.html> honlapon leírtaknak megfelelően lehet letölteni, telepíteni és indítani. Az egérrel való kattintás mellett azon menüpontok, illetve gombok, amelyeken van aláhúzott betű/szám, az **Alt + betű/szám** billentyűkombinációval is elérhetők.

2.3. Meteorológiai adatok

A szennyeződésfelhők terjedésének szimulációihoz NetCDF (Network Common Data Form) formátumú fájlokban adott meteorológiai adatok szükségesek. Ilyen adatok például az ECMWF (European Center for Medium-range Weather Forecasts) adatbázisaiból (ERA-40, ERA-Interim stb. [7]) regisztráció után szabadon letölthetők különböző időbeli és térbeli felbontásokban. Az adatokat a teljes Földre, és legalább 6 órás időbeli felbontással érdemes letölteni. A fájlok program által elvárt jellemzői a következők:

- A meteorológiai adatok szabályos hosszúsági–szélességi rácson ($[0^\circ : dx : 360^\circ - dx] \times [-90^\circ : dy : 90^\circ]$), különböző nyomási szinteken adottak, ahol dx és dy a rácsfelbontás. A legalsó szintet tekinti a program a Föld felszínének, a legfelsőt a légkör „tetejének”.
- A szükséges meteorológiai változók: a szélesség zónális [m/s], meridionális [m/s] és függőleges [Pa/s] komponense és a hőmérséklet [K].
- Egy meteorológiai fájl egyetlen időpontra egyetlen meteorológiai változónak a fenti rácson megadott adatait tartalmazza.
- A fájl neve: **<változó neve><yyyyMMddhhmmss>.nc**.²

Az ECMWF adatbázisából a kiválasztott időpontok összességéhez egyetlen, tömörített NetCDF fájlt tudunk egyszerűen letölteni. Ebből például az NCO [8] segítségével a következőképpen tudjuk egy adott időponthoz tartozó meteorológiai fájlokat előállítani Linux operációs rendszeren:

- **nepdq -P upk input.nc output1.nc**: kicsomagolja a letöltött NetCDF fájlt,
- **ncks -d time,\$t,\$t -v \$v output1.nc output2.nc**: ciklusban alkalmazva az output1.nc fájlból a \$t időpontra a \$v változó mezőit kiírja az output2.nc fájlba.

2.4. Kimenő adatok

A program a terjedési szimulációk során a szennyeződésfelhők részecskéinek adatait CSV kiterjesztésű szöveges fájlokba írja, így ezek más programmal is könnyen beolvashatók, feldolgozhatók. Egy-egy fájl egy adott időpontra vonatkozik, és a szennyeződésfelhő részecskéinek számának megfelelő sort tartalmaz. A fájl neve: **<megadott fájl névminta><yyyyMMddhhmmss>.csv**. Egy sor a következő adatokat tartalmazza (vesszőkkel elválasztva): λ , φ , z , r , ρ_p , in , ahol

- λ : a részecske hosszúsági koordinátája [radián] $[0; 2\pi]$,
- φ : a részecske szélességi koordinátája [radián] $[-\pi; \pi]$,

² Az <yyyyMMddhhmmss> formátum a következőt jelöli: az év (yyyy) 4, a hónap (MM), a nap (dd), az óra (hh), a perc (mm), a másodperc (ss) 2 számjeggyel megadva.

- z : a részecske magassági koordinátája [m] a részecske p nyomási koordinátájából a standard légkörben számítva,
- r : a részecske sugara [μm] $[0; \infty)$,
- ρ_p : a részecske sűrűsége [kg/m^3] $[0; \infty)$,
- in : a részecske a légkörben van-e még [1] vagy már elhagyta [0].

A program a felhasználó választása esetén számítja a szennyeződésfelhő hosszát [km], illetve a ki nem ülepedett részecskék arányát is. Ezen mennyiségek természetes alapú logaritmusát írja ki a felhasználó által megadott időpontokban fájlba. A hossz, illetve a légkörben maradó részecskék arányára vonatkozó fájl egyes sorainak formátuma: `<yyyyMMddhhmmss><tab>ln(mennyiség)`.

2.5. Szimuláció indítása

A program indítása után a képernyőn egy új szimuláció indítására vonatkozó különböző beállítási lehetőségek jelennek meg. Ezek magukba foglalják a szimuláció, valamint a szennyeződésfelhő paramétereinek a megadását. Ez a képernyő a **File** menüből a **New simulation – set parameters** menüpontból is elérhető. A menüből ezen kívül a **New simulation – read particles** menüpontra kattintva elérhető az új szimulációk indításának másik módja, amikor a szennyeződésfelhőt nem paraméterekkel adjuk meg, hanem annak részecskéit egy fájlból olvassa be a program.

2.5.1. A szimuláció paramétereinek beállítása

Akár a **New simulation – set parameters**, akár a **New simulation – read particles** menüpontot választja a felhasználó, mindkét esetben először a szimuláció paramétereit kell megadnia (a képernyő bal oldala, 1. ábra és 2. ábra):

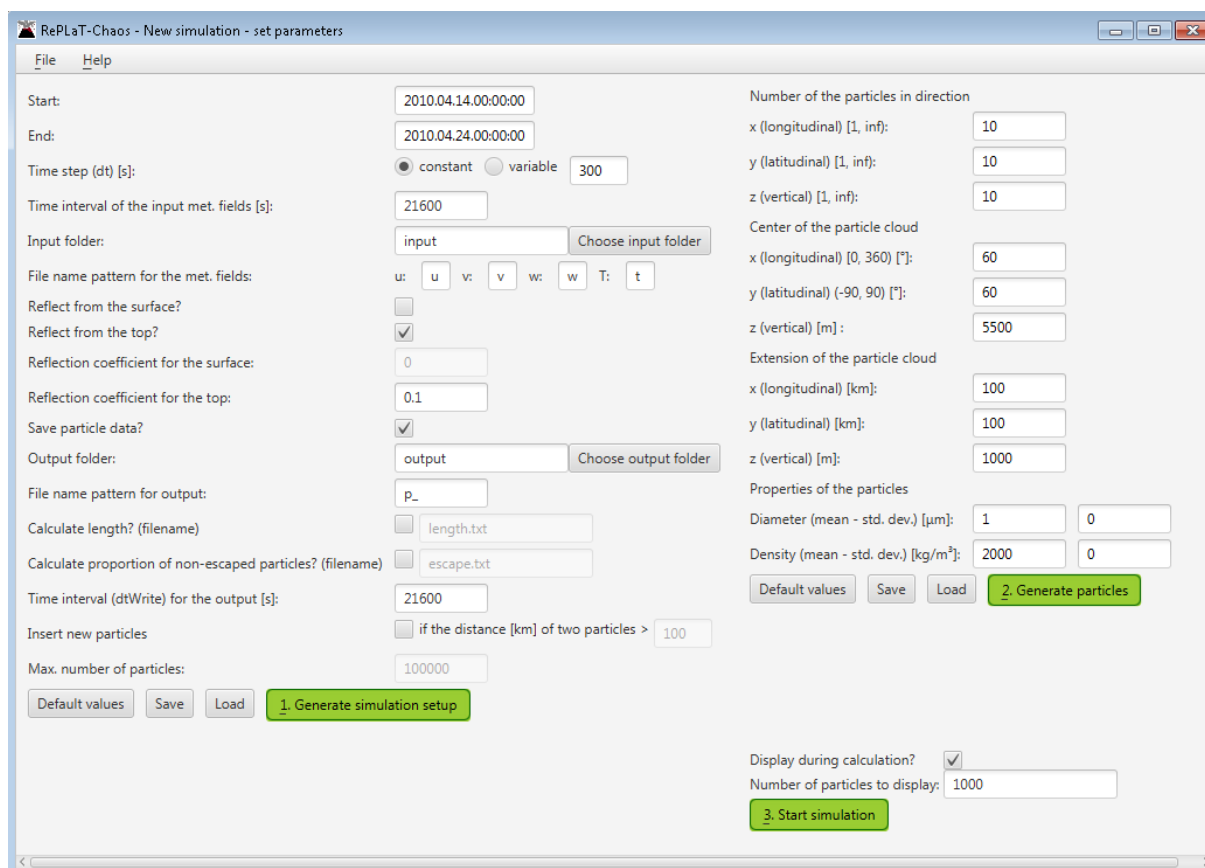
- **Start**: a szimuláció kezdete (formátum: `<yyyy.MM.dd.hh:mm:ss>`).
- **End**: a szimuláció vége (formátum: `<yyyy.MM.dd.hh:mm:ss>`).
- **Time step**: ha állandó (**constant**), akkor a szövegmező a szimuláció állandó időlépése [s] (formátum: egész szám); ha változó (**variable**), akkor a szövegmező a 3.1 szakaszbeli Δt_{\min} -nek felel meg.
- **Input folder**: a meteorológiai fájlok mappája. A **Choose input folder** gombra kattintva ki is választható, vagy a szövegmezőbe közvetlenül be is írható.
- **File name pattern for the met. fields**: a levegő zonális (**u**), meridionális (**v**), függőleges (**w**) sebességkomponensének és a hőmérséklet (**T**) fájljainak a dátum-időpont előtti része.
- **Reflect from the surface?**: bekattintva az összes részecske a **Reflection coefficient for the surface**-ban beállított együtthatóval (formátum: valós szám) visszapattan a legalsó meteorológiai szintről az együttható valószínűségével. Topologikus entrópia (hossz) számítása esetén érdemes bejelölni, és együtthatónak 1-et megadni.
- **Reflect from the top?**: bekattintva az összes részecske a **Reflection coefficient for the top**-ban beállított együtthatóval visszapattan a legfelső meteorológiai szintről. Általában

érdeemes bejelölni, hacsak nem azt akarjuk vizsgálni, hogy a szennyeződésfelhő milyen arányban jut egy bizonyos (legfelső) szint fölé.

- **Save particle data?:** a program kiírja-e fájlba a szennyeződésfelhő részecskéit (és a hosszra, valamint a ki nem ülepedett részecskék arányára vonatkozó adatokat). Akkor nem érdemes bejelölni, ha a felhasználó csupán próbaszámításokat végez, csak helyben szeretné a felhő terjedését nézni, később nincs szüksége az adatokra.
- **Output folder:** a kiírt részecske-, hossz- és ki nem ülepedett részecskék arányára vonatkozó fájlok mappája. A **Choose output folder** gombra kattintva ki is választható, vagy a szövegmezőbe közvetlenül be is írható.
- **File name pattern for the output:** a részecskék fájljának dátum-időpont előtti része.
- **Calculate length? (filename):** számolja-e a szennyeződésfelhő hosszát a program szimuláció közben, és ha igen, mi legyen a fájl neve, amibe az adatokat kiírja. A szennyeződésfelhő hosszát a program az egymást követő részecskék közötti távolságok összegéből határozza meg, így csak akkor adja vissza a szennyeződésfelhő tényleges hosszát, ha a részecskék egy egydimenziós „felhőből”, egy vonalból indulnak.
- **Calculate proportion of non-escaped particles? (filename):** számolja-e a ki nem ülepedett részecskék arányát a program szimuláció közben, és ha igen, mi legyen a fájl neve, amibe az adatokat kiírja.
- **Time interval for the output:** milyen időközönként írja ki fájlba a program a szennyeződésfelhő, a hossz és ki nem ülepedett részecskék arányának adatait [s] (formátum: egész szám).
- **Insert new particles if the distance [km] of two particles:** szúrjon-e be a szimuláció során a program új részecskéket, amennyiben két egymást követő részecske közötti távolság meghaladja a megadott távolságot (formátum: valós szám). Hossz-számítás esetén érdemes bejelölni, különben az egymást követő részecskék túl távolra kerülhetnek egymástól, ami a szennyeződésfelhő hosszának levágását, alulbecslését, egyre lassuló ütemű növekedését okozza. A topologikus entrópia számításánál ez abban nyilvánul meg, hogy a hossz-görbe az exponenciális függvényhez képest „lekonyul”.
- **Max. number of particles:** legfeljebb ennyi lehet a részecskeszám a szimulációban a beszúrásokkal együtt (formátum: egész szám).

A mezőkbe alapértelmezetten az alapbeállítások töltődnek be, amelyeket a program a **default/default_simulation_setup.txt**-ből olvas be (ezek az adatok át is írhatók a fájlban). A felhasználónak lehetősége van bármelyik mező átírása után az alapértelmezett adatokat visszatölteni a **Default** gomb megnyomásával, valamint a mezőket kitöltheti egy általa választott fájlból a **Load** gombra kattintva, illetve a mezők értékeit el is mentheti a **Save** gombra kattintva egy új fájlba. Ha van hibásan kitöltött vagy üres mező, az adatokat nem lehet elmenteni. Ezt egy felugró ablak jelzi, és a hibásan kitöltött mezőt pirossal jelöli ki a program.

A szimuláció indításához először szükséges a szimulációs beállítások legenerálása: ezt a **Generate simulation setup** gombra kattintva állíthatja elő a felhasználó. Ha van hibásan kitöltött mező vagy üres mező, a mentéshez hasonlóan ezt egy felugró ablakban jelzi a program, és a mezőt pirossal jelöli ki. Ha nincs, akkor egy felugró ablak jelzi, hogy a szimulációs beállítást legenerálta a program („Simulation setup is generated.”). Ekkor az eddig letiltott jobb oldal (a szennyeződésfelhő paramétereinek megadása (1. ábra) vagy a szennyeződésfelhő részecskéinek beolvasása rész (2. ábra)) elérhetővé válik.



1. ábra: New simulation - set parameters. Szimuláció indítása a szimuláció és a szennyeződéshő paramétereinek megadásával.

2.5.2. A szennyeződéshő paramétereinek megadása

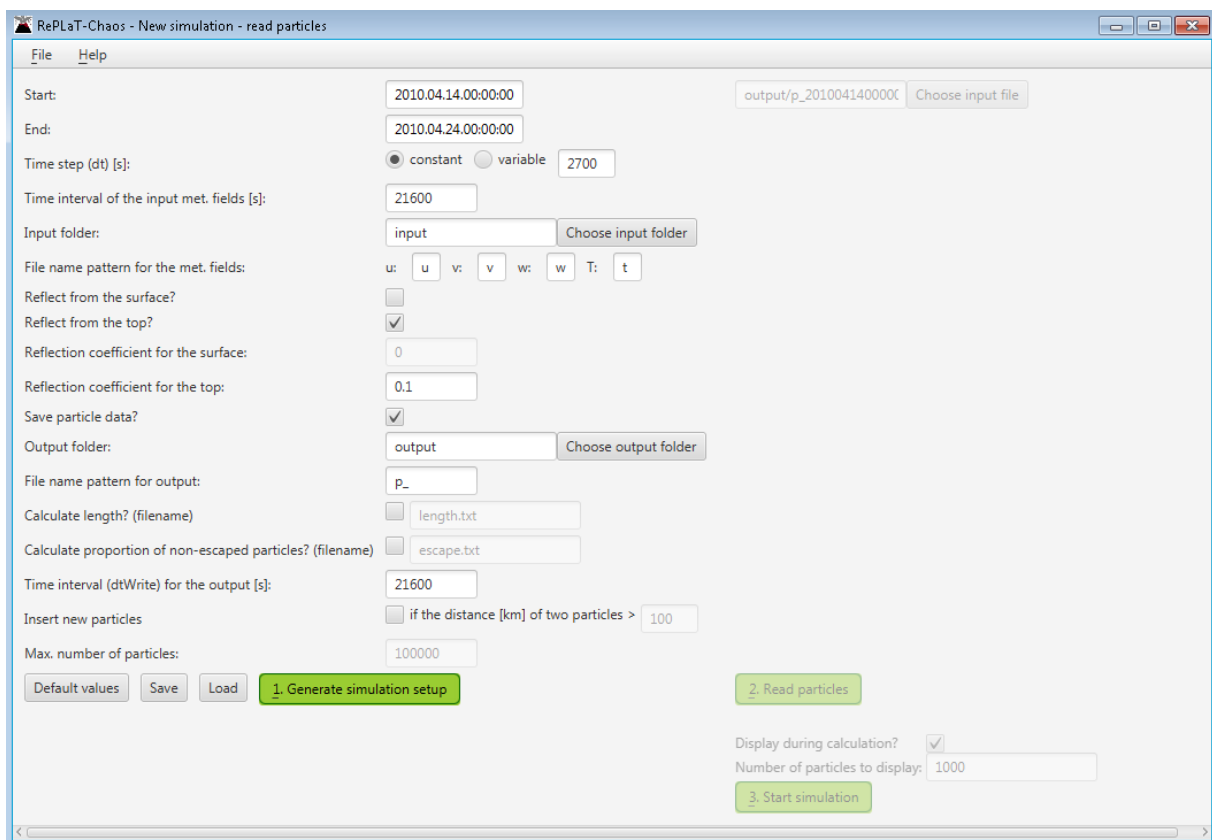
A szennyeződéshő megadása esetén a felhasználó egy téglatestben elhelyezkedő részecskék következő paramétereit adhatja meg:

- **Number of particles in direction x / y / z:** a részecskék száma zonális, meridionális és függőleges irányban (formátum: egész, mindegyik legalább 1).
- **Center of the particle cloud x / y / z:** a szennyeződéshő középpontjának koordinátái zonális, meridionális irányban [°], illetve függőlegesen [m] (formátum: valós számok a megadott intervallumokban).
- **Extension of the particle cloud x / y / z:** a szennyeződéshőt képviselő téglatest oldalainak zonális, meridionális irányú [°], és függőleges [m] hossza (formátum: nem negatív valós számok)
- **Diameter (mean – std.dev.):** a részecskék átmérője ilyen várható értékű és szórású [μm] lognormális eloszlásból származik (formátum: nem negatív valós számok). A 0 μm átmérőjű részecskék gázoknak felelnek meg, melyek minden időpillanatban a pozíciójukban aktuális légköri áramlások sebességével sodródnak (határsebességük 0).
- **Density (mean – std.dev.):** a részecskék sűrűsége ilyen várható értékű és szórású [kg/m³] lognormális eloszlásból származik (formátum: nem negatív valós számok)

A mezőkbe alapértelmezetten az alapbeállítások töltődnek be, amelyeket a program a **default/default_particle_parameter_setup.txt**-ből olvas be (ezek az adatok ebben az esetben is átírhatók a fájlban). A **Default, Save, Load** gombok a szimulációs beállításoknál leírtakhoz hasonlóan használhatók.

A szimuláció indításához szükséges a szennyeződéshő legenerálása is: ez a **Generate particles** gombra kattintva állítható elő. Ha van hibásan kitöltött vagy üres mező, ezt egy felugró ablakban jelzi a program („There are incorrect fields (marked by red).” / „Empty textfield(s)”), és a mezőt pirossal jelöli ki. Ha nincs, akkor egy felugró ablak jelzi, hogy a szennyeződéshőt legenerálta a program („Number of particles: <részecskeszám>.”). Ekkor az eddig letiltott alsó rész jobb oldalt (a szimuláció megjelenítésének beállítása, szimuláció indítása (1. ábra)) elérhetővé válik.

2.5.3. A szennyeződéshő részecskéinek beolvasása



2. ábra: New simulation - read particles. Szimuláció indítása a szimuláció paramétereinek megadásával és a szennyeződéshő részecskéinek fájlból való beolvasásával.

A szennyeződéshő részecskéinek beolvasása esetén (2. ábra) a felhasználó kiválaszthatja a **Choose input file** gomb segítségével a részecskék kezdőfeltételeit tartalmazó fájlt. Az alapértelmezett fájl a **default/default_particle_file_setup.txt** fájlban található. A fájlban az adatok formátumának és értékeinek a 2.4. fejezetben leírtaknak kell megfelelnie. A **Read particles** gombra kattintva a program beolvassa a fájlból a részecskék adatait. Hibás értékű adatok esetén felugró ablak jelzi ezt: „There were invalid data while reading from file <file> <hibás sorok>”. Amennyiben nincs hibás adat, akkor egy felugró ablak jelzi, hogy a szennyeződéshőt legenerálta a program („Number of particles: <részecskeszám>.”). Ekkor

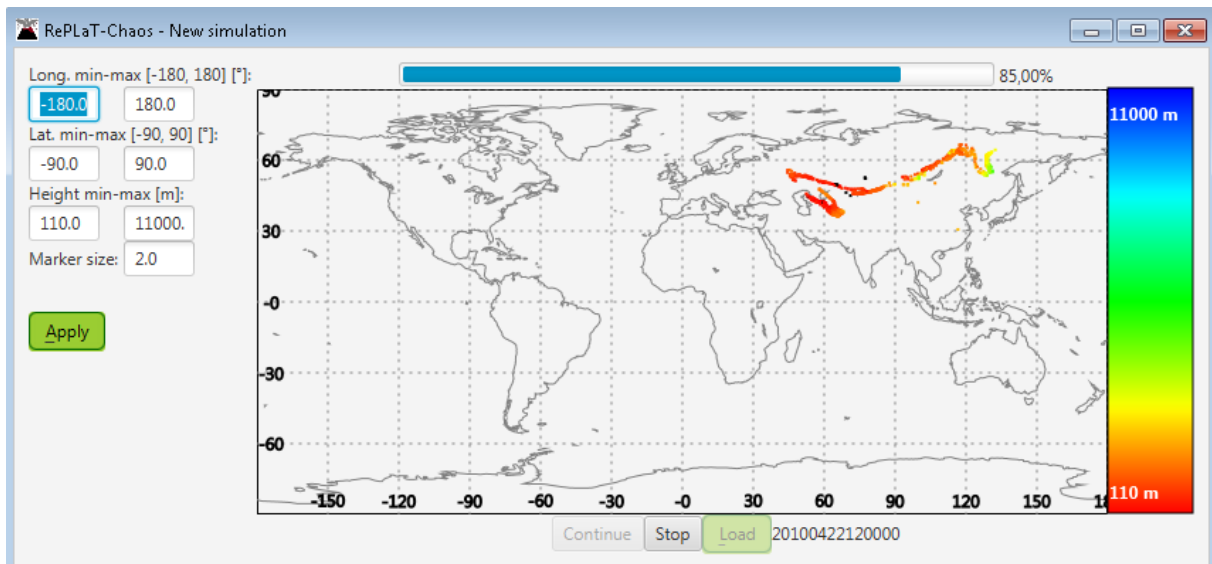
az eddig letiltott alsó rész jobb oldalt (a szimuláció megjelenítésének beállítása, szimuláció indítása (2. ábra)) elérhetővé válik.

A szennyeződésfelhő ilyen legenerálását például akkor érdemes alkalmazni, ha a részecskéket nem az előző szakasz által biztosított téglatestből szeretnénk indítani, hanem tetszőleges pozíciókból. A fájlból való beolvasás segítségével egyszerre több különböző helyről induló részecskecsoport (különböző szennyeződésfelhők) útja is nyomon követhető egy időben.

2.5.4. A szimuláció elindítása

A jobb alsó sarokban (1. ábra, illetve 2. ábra) a felhasználó beállíthatja, hogy szeretné-e látni a szennyeződésfelhő terjedését a szimuláció során (**Display during calculation?**), és ha igen, a felhő hány részecskéje rajzolódjon ki (**Number of particles to display**). A **Start** gombra kattintva elindul a szimuláció, és egy új ablak nyílik a futás megjelenítésére (3. ábra).

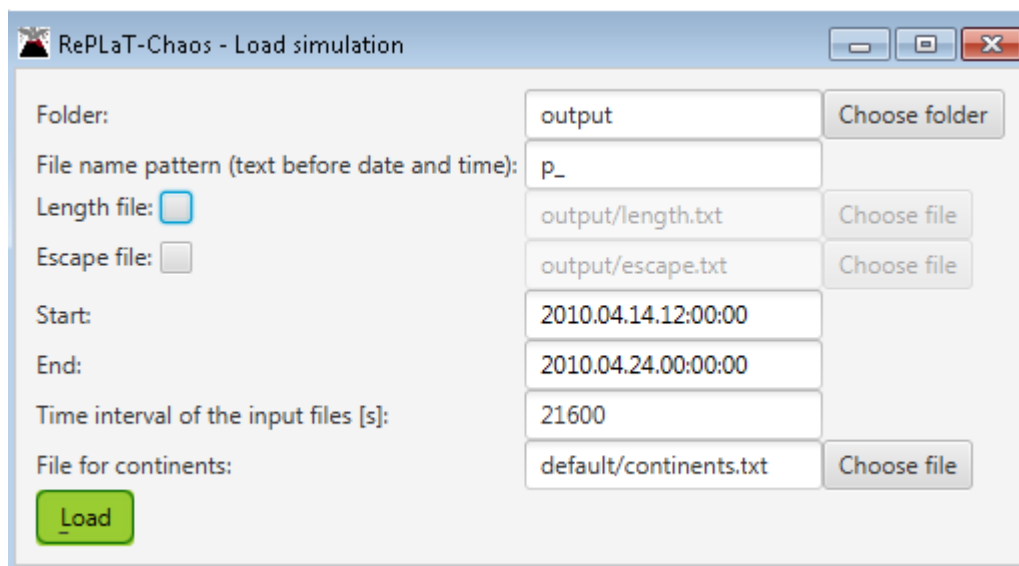
2.5.5. Szimuláció alatti megjelenítés beállításai



3. ábra: A szimuláció futásának követése a részecskék helyzetének megjelenítésével.

Attól függően, hogy a felhasználó bejelölte-e, a szimuláció közben a program egy térkép felett megjeleníti a szennyeződésfelhő részecskéinek aktuális helyzetét is (a függőleges koordináták szerinti színezéssel), vagy csak egy folyamatjelző sávot, amelyről leolvasható, hogy a teljes szimulációs időintervallum hány százalékánál és melyik időpontnál jár a számítás. A felhasználó a **Stop** és a **Continue** gombokkal a szimulációt leállíthatja, illetve folytathatja, a **Load** gombra kattintva pedig a már fájlba mentett eredményeket töltheti be. Az ablak bal oldalán lévő mezőkkel megadható más térkép kivágat, a részecskék különböző magasság szerinti színezése, valamint a részecskék kirajzolási mérete (formátumok: valós számok a megadott intervallumokban). A beállítások az **Apply** gombbal érvényesíthetők. Hibás adatok vagy üres szövegmező megadása esetén ezt egy felugró ablak jelzi, és a hibás mezőt pirossal színezi a program.

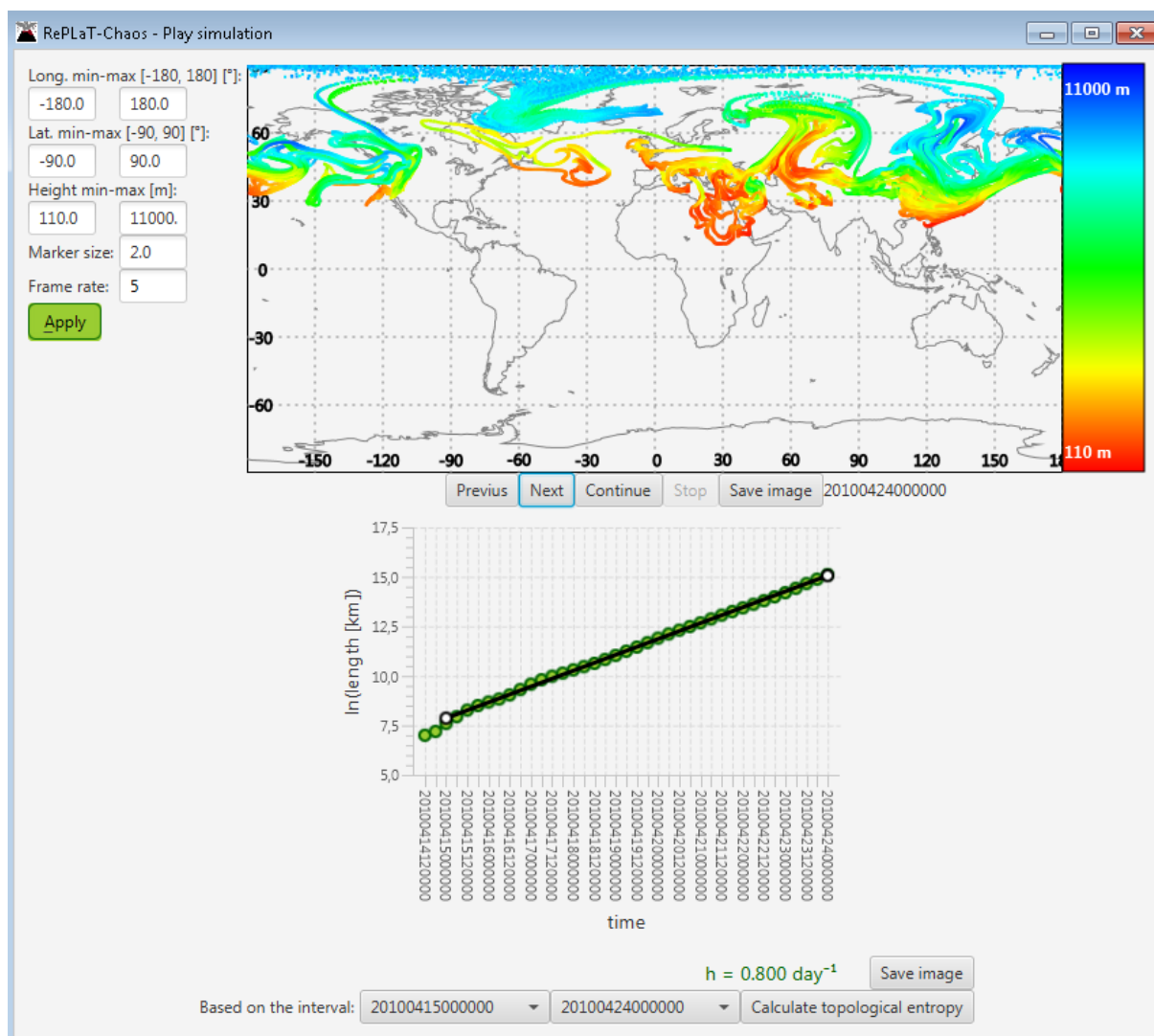
2.6. Mentett szimuláció lejátszása



4. ábra: Mentett szimuláció betöltéséhez az adatok megadása.

Mentett szimulációt az új szimuláció kezdőképernyőn a **File** menüből a **Load simulation** menüpontra vagy aktuális szimuláció számítása esetén a **Load** gombra kattintva lehet megjeleníteni. Ekkor egy új ablakban (4. ábra) megjelennek a mentett szimulációra vonatkozó paraméterek. Aktuális szimuláció esetén a mezőkbe a szimulációs beállításban megadott adatok, egyébként a **default/default_load_setup.txt**-ben megadott adatok töltődnek be. A beállítandó paraméterek:

- **Folder:** a betöltendő fájlok mappája. A **Choose folder** gombra kattintva kiválasztható, vagy a szövegmezőbe közvetlenül is beírható.
- **File name pattern:** a szennyeződéshők fájljainak dátum-időpont előtti része.
- **Length file:** töltsön-e be a program hosszadatokat, és ha igen, melyik fájlból. Ez a **Choose file** gombra kattintva is kiválasztható vagy a szövegmezőbe közvetlenül beírható.
- **Escape file:** töltsön-e be a program a ki nem ülededett részecskék arányára vonatkozó adatokat, és ha igen, melyik fájlból. Ez a **Choose file** gombra kattintva is kiválasztható vagy a szövegmezőbe közvetlenül beírható.
- **Start:** a kirajzolás kezdete (formátum: <yyyy.MM.dd.hh:mm:ss>)
- **End:** a kirajzolás vége (formátum: <yyyy.MM.dd.hh:mm:ss>)
- **Time interval of the input files:** a kirajzolandó fájlok időpontjai közötti idő [s] (formátum: egész szám)
- **File for continents:** a térképhez a kontinensek körvonalának koordinátáit ($[-\pi; \pi] \times [-\pi/2; \pi/2]$ [rad]) tartalmazó fájl. Ez a **Choose file** gombra kattintva is kiválasztható vagy a szövegmezőbe közvetlenül beírható.

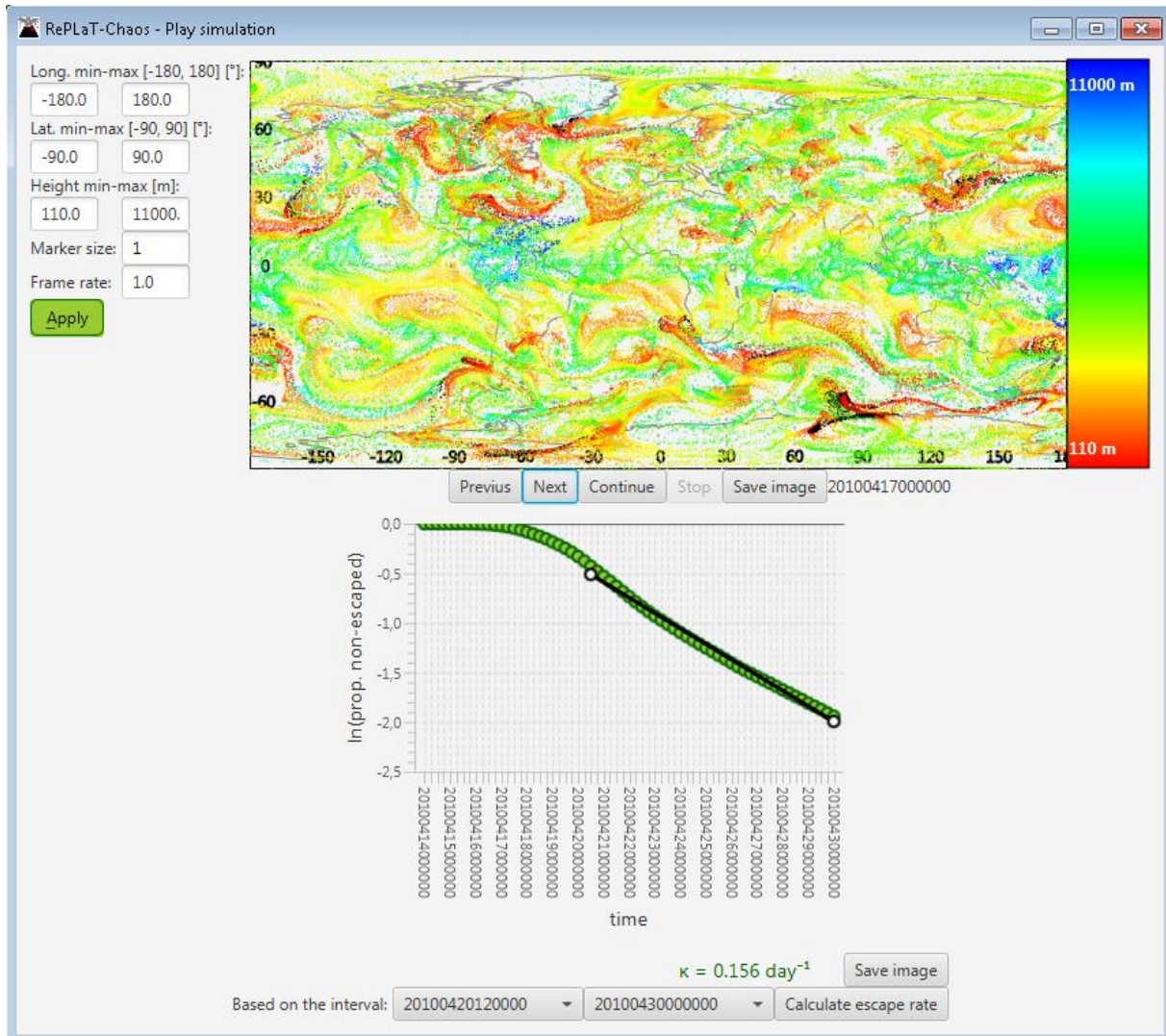


5. ábra: Mentett szimuláció és a hozzá tartozó hossz megjelenítése.

A **Load** gombra kattintva a kiválasztott szimuláció betöltődik. A szennyeződéshő kirajzolása alatt a **Length file** és **Escape file** bejelölésétől függően megjelenik a szennyeződéshő $\ln(\text{hossza})$ -nak, illetve az $\ln(\text{ki nem ülepedett részecskék aránya})$ -nak időfüggése is egy-egy grafikonon (5. ábra, 6. ábra). A kirajzolás alapértelmezetten időben előrefele ciklikusan történik a megadott képsebességnek (**Frame rate**) megfelelően. A felhasználó a **Stop** és a **Continue** gombokkal leállíthatja vagy folytathatja a kirajzolást, a **Previous** és **Next** gombok megnyomásával pedig egyesével léptetheti előrefele és hátrafele. A **Save image** gombra kattintva a felhasználó elmentheti a szennyeződéshő pillanatnyi helyzetét. A kirajzolás beállításai (térkép kivágat, részecskék) a 2.5.5. fejezetben ismertetett módon állíthatók át az **Apply** gombra kattintva. Itt ezen kívül még a lejátszás gyorsasága (Frame rate) is módosítható.

Amennyiben a felhasználó betöltött hosszadatokat és/vagy a ki nem ülepedett részecskék arányát tartalmazó fájlokat, az ablak alsó részén kiválaszthat a két legördülő

menüből egy kezdő- és végidőpontot. A **Calculate topological entropy**, illetve a **Calculate escape rate** gombra kattintva a program a megadott időintervallumban a legkisebb négyzetek módszerével egyenest illeszt a grafikon pontjaira, és kiírja ennek meredekségét (azaz a topologikus entrópiát (5. ábra)), illetve (-1) -meredekségét (azaz a szökési rátát (6. ábra)). A kirajzolt grafikonokat a **Save image** gombra kattintva el is lehet menteni.



6. ábra: Mentett szimuláció és a hozzá tartozó ki nem üledett részecskék arányának megjelenítése.

3. Elméleti háttér

3.1. A részecskék mozgásának meghatározása

Kis méretű aeroszol részecskék esetén megmutatható [2], hogy a részecskék vízszintes sebességkomponenseit az aktuális helyi szélmező vízszintes komponensei határozzák meg, míg függőleges mozgásukhoz a levegő függőleges sebességkomponensén kívül a részecskék nehézségi erőből adódó határsebessége³ is hozzájárul. A program vízszintes irányban szabályos hosszúsági–szélességi hálón, függőlegesen különböző nyomási szinteken adott meteorológiai adatokat használ fel, ezért vízszintesen gömbi polárkoordinátákat, függőlegesen nyomási koordinátákat alkalmazva a részecskék mozgását a következő egyenletek határozzák meg:

$$\begin{aligned}\frac{d\lambda(t)}{dt} &= u_{\text{rad}}(\lambda(t), \varphi(t), p(t), t) = \frac{u(\lambda(t), \varphi(t), p(t), t)}{R \cos(\varphi(t))}, \\ \frac{d\varphi(t)}{dt} &= v_{\text{rad}}(\lambda(t), \varphi(t), p(t), t) = \frac{v(\lambda(t), \varphi(t), p(t), t)}{R}, \\ \frac{dp(t)}{dt} &= \omega(\lambda(t), \varphi(t), p(t), t) + \omega_{\text{term}}(\lambda(t), \varphi(t), p(t), t),\end{aligned}$$

ahol $\lambda(t)$, $\varphi(t)$, $p(t)$ a részecske hosszúsági, szélességi [rad] és nyomási [Pa] koordinátái a t időpillanatban, u , v , ω a sebességmező zonális, meridionális [m/s] és függőleges [Pa/s] sebességkomponensei, $u_{\text{rad}}(\mathbf{r}(t), t)$, $v_{\text{rad}}(\mathbf{r}(t), t)$ a sebességmező zonális és meridionális szélkomponensei [rad/s]-ban, $R = 6371$ km a Föld sugara, ω_{term} pedig a részecske határsebessége, mely a következőképpen határozható meg:

$$\omega_{\text{term}} = \begin{cases} \frac{2 \rho_p r^2 g^2}{9 \nu} & , \text{ ha } \text{Re} \ll 1, \\ \sqrt{\frac{8 \rho_p \rho r}{3 C_D}} g^3 & , \text{ ha } \text{Re} \gg 1, \end{cases}$$

ahol ρ_p a részecske sűrűsége, ρ a levegő sűrűsége, r a részecske sugara, g a nehézségi gyorsulás, ν a kinematikai viszkozitás, C_D az alaktényező (gömb alakúnak feltételezett részecskék esetén $C_D = 0,4$), $\text{Re} = 2rV/\nu$ a Reynolds-szám (V karakterisztikus sebesség, melyről belátható, hogy a határsebességhez tart). A gázok $r = 0$ μm sugarú „részecskéknek” feleltethetők meg ebben a megközelítésben, melyeknek a határsebessége $\omega_{\text{term}} = 0$.

A fenti egyenletekhez szükséges meteorológiai adatok a szélmező u , v , ω komponensei, illetve a levegő ρ sűrűsége és ν kinematikai viszkozitása. Ez utóbbi két változó azonban nem tölthető le meteorológiai adatbázisokból, így ezeket a T hőmérséklet segítségével határozzuk meg. A sűrűség kifejezhető az ideális gázok állapotegyenletéből az alábbi alakban:

$$\rho = \frac{P}{R_d T},$$

³ A részecske a határsebességével esik álló levegőben, ha a rá ható erők éppen kiegyensúlyozzák egymást.

ahol $R_d = 287 \text{ J/kg/K}$ a száraz levegő gázállandója. A kinematikai viszkozitást a μ dinamikai viszkozitás segítségével lehet megadni, ahol μ már szintén a T hőmérséklet függvénye (Sutherland-törvény [4]):

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}, \text{ ahol}$$

$$\mu = \beta \frac{T^{3/2}}{T + T_S}, \text{ azaz}$$

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} = \beta \frac{T^{5/2}}{T + T_S} \frac{R_d}{p},$$

ahol $\beta = 1,458 \cdot 10^{-6} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-0.5}$ a Sutherland-állandó és $T_S = 110,4 \text{ K}$ a Sutherland-hőmérséklet.

Így a részecskék mozgását leíró három egyenletből álló közönséges differenciálegyenlet-rendszer jobb oldalán már minden mennyiség ismert. A differenciálegyenleteket a más terjedési modelleknél is szokásos explicit másodrendű Runge–Kutta-módszerrel oldja meg a program. Így egy részecske $\mathbf{r}(t + \Delta t) = [\lambda(t + \Delta t), \varphi(t + \Delta t), p(t + \Delta t)]$ pozíciója a $t + \Delta t$ időpontban a $\mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t) = [u_{\text{rad}}(\mathbf{r}(t), t), v_{\text{rad}}(\mathbf{r}(t), t), \omega(\mathbf{r}(t), t) + \omega_{\text{term}}(\mathbf{r}(t), t)]$ sebességnek a függvényében a következőképpen számítható:

$$\mathbf{r}_0(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t) \Delta t \quad (\text{segéd lépés}) \text{ és}$$

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \frac{1}{2} [\mathbf{v}(\mathbf{r}(t), t) + \mathbf{v}(\mathbf{r}_0(t + \Delta t), t + \Delta t)] \Delta t.$$

A felhasznált meteorológiai adatok csak szabályos hosszúsági–szélességi rácson, különböző nyomási szinteken adottak, bizonyos (pl. 3 vagy 6 órás) időbeli felbontásban. Ezért a részecskék mozgásegyenletének a megoldásához, a részecskék útvonalának számításához az u, v, ω, T adatokat a részecskék aktuális helyére kell térben és időben interpolálni. A program a legtöbb terjedési modellhez hasonlóan mindhárom irányban, valamint időben is lineáris interpolációt alkalmaz.

A Δt időlépés a programban megadható állandónak, illetve változónak is. Ez utóbbi esetben a program a Courant–Friedrichs–Levy-kritérium alapján számítja az időlépést a következő egyenlettel:

$$\Delta t_{\text{CFL}} = \text{CFL} \cdot \min \left\{ \frac{\Delta \lambda_g}{|u_{\text{rad}}(\mathbf{r}(t), t)|}; \frac{\Delta \varphi_g}{|v_{\text{rad}}(\mathbf{r}(t), t)|}; \frac{\Delta p_g}{|\omega(\mathbf{r}(t), t) + \omega_{\text{term}}(\mathbf{r}(t), t)|} \right\},$$

ahol $\Delta \lambda_g, \Delta \varphi_g, \Delta p_g$ a rácsméret zonális, meridionális [rad] és függőleges [Pa] irányban, $\text{CFL} < 1$ a Courant–Friedrichs–Levy-szám. A minimális Δt_{min} időlépés értékét a felhasználó határozza meg, és ha Δt ezek alapján nagyobb lenne annál az időtartamnál ($t_{\text{next}} - t$), ami a részecskék adatainak következő fájlba mentéséig vagy a következő meteorológiai mező beolvasásáig hátra van, akkor az időlépés ennek megfelelően módosul:

$$\Delta t = \min \{ t_{\text{next}} - t; \max \{ \Delta t_{\text{CFL}}; \Delta t_{\text{min}} \} \}.$$

3.2. Topologikus entrópia

A dinamikai rendszerek elméletében az ún. topologikus entrópia a mozgás bonyolultságának, szabálytalanságának mértékét számszerűsíti. A káosz egyik lehetséges definíciója szerint egy rendszer kaotikus, ha a topologikus entrópia pozitív [3]. A légköri áramlásokban való sodródás hatására egy-egy szennyeződéssel alakja hamar eltorzul, az idő során gyorsan nyúlik: a szennyeződéssel L hossza jó közelítéssel exponenciálisan nő a t idővel, vagyis $L(t) \sim \exp(ht)$ (7. ábra). A szennyeződések terjedése esetén éppen a h kitevő felel meg a topologikus entrópiának. Minél nagyobb értéket vesz fel, a szennyeződéssel hosszabbá annál sebesebben növekszik, annál bonyolultabb, kacsaringósabb alakot mutathat [5].

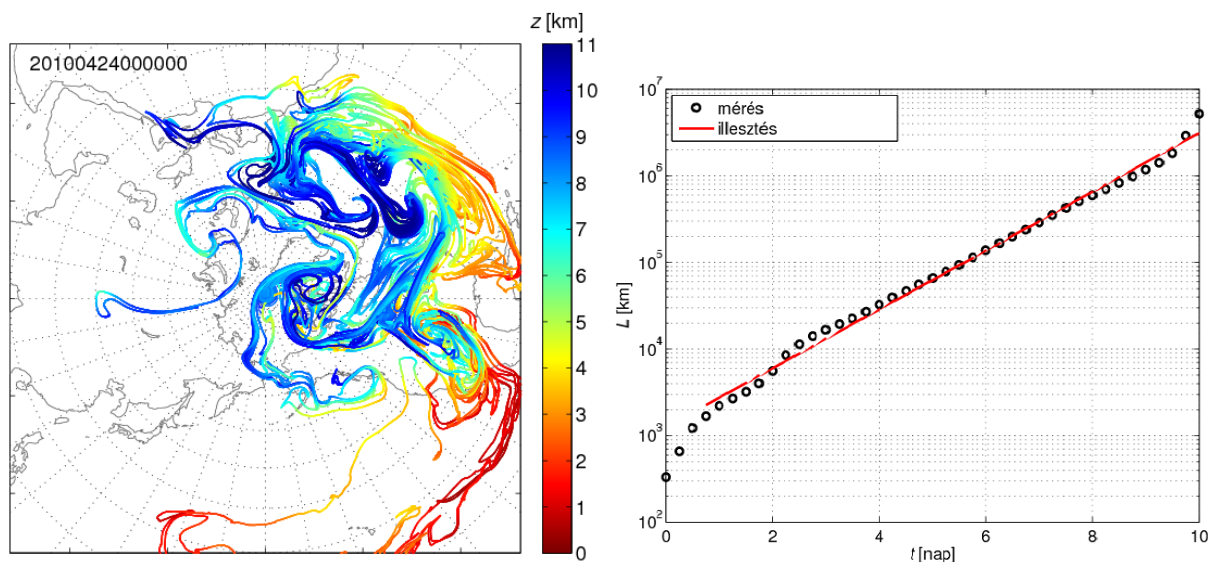
Egydimenziós, vonalszerű szennyeződéssel esetén a felhő szomszédos részecskéi közötti távolságokat összeadva kapjuk a szennyeződéssel hosszát:

$$L(t) = \sum_{i=1}^{n-1} |\mathbf{r}_{i+1}(t) - \mathbf{r}_i(t)|,$$

ahol $\mathbf{r}_i(t)$ az i -edik részecske pozíciója. A függőleges irányban történő nyúlás a vízszintes irányban zajló nyúlás 10^{-2} – 10^{-3} -ed részének bizonyult a szimulációkban [3], ezért elhanyagolható. A két egymást követő részecske közötti vízszintes távolság [km] meghatározása gömbi főkörök mentén történik:

$$|\mathbf{r}_{i+1}(t) - \mathbf{r}_i(t)|_{\text{hor}} = \arccos[\sin \varphi_i \sin \varphi_{i+1} + \cos \varphi_i \cos \varphi_{i+1} \cos(\lambda_i - \lambda_{i+1})] \times \frac{180}{\pi} \times 111.1,$$

ahol λ_i and φ_i az i -edik részecske hosszúsági, illetve szélességi koordinátája, és a $(180/\pi) \times 111.1$ a radián mértékegységben kapott értéket számítja át kilométerre, felhasználva, hogy az 1° -os gömbi távolság 111.1 km-nek felel meg a Földön.



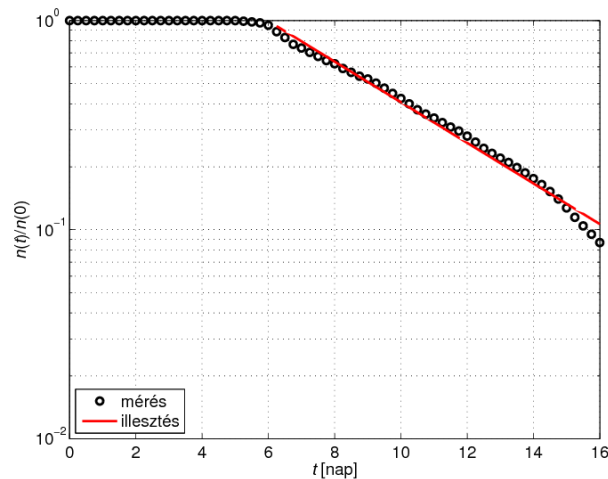
7. ábra: A szennyeződéssel hosszabbá exponenciális ütemben nő a légköri sodródás során. Bal: Egy kezdetben 300 km hosszú vonaldarab 10 nap elteltével betéríti az Északi-félteke jelentős részét. Jobb: A vonaldarab hosszának időfüggése.

Mivel az egymást követő részecskék idővel elég távol is kerülhetnek egymástól, az ugyanezekből a kezdőfeltételekből induló, de végtelen sok részecskével rendelkező

(folytonos) felhő hosszához képest a hosszt alulbecsüljük véges számú részecske esetén. Ez például abban is megnyilvánulhat, hogy a számított hossz bizonyos idő után, amikor már sok a „levágott” szakasz a részecskék között, eltér az exponenciális függvénytől, kisebb értékeket vesz fel. Ezen alulbecslés csökkentése érdekében egy kritikus távolságnál messzebb kerülő részecskepár esetén érdemes a két részecske közé új részecskéket beszúrni a szimulációban.

3.3. Szökési ráta

Az előző fejezetben említett kaotikus mozgást a szennyeződé felhők részecskéi csupán véges ideig végezhetik, mivel például a Föld felszínét elérve kiülepedhetnek. Ezt a típusú káoszt tranziens káosznak nevezik [3]. Létezik azonban egy nullmértékű halmaz, az ún. kaotikus nyereghalmaz, amelyről indulva a részecskék a terjedés során sohasem hagynák el azt, és végtelen hosszú ideig kaotikus mozgást végeznének. Mivel nullmértékű halmazról van szó, annak a valószínűsége, hogy kezdetben a részecskék éppen a halmazon helyezkedjenek el, nulla, és a részecskék előbb-utóbb elhagyják a nyereghalmaz tetszőleges nagyságú környezetét. Ennek az elhagyásnak a gyorsaságát jellemzi a szökési ráta. Elegendően hosszú t_0 idő után a tartományban (a légköri szimulációkban a meteorológiai adatok által meghatározott szimulációs tartományban) maradó részecskék $n(t)/n(0)$ aránya a tapasztalat szerint exponenciális csökkenést mutat: $n(t)/n(0) \sim \exp(-\kappa t)$ (ha $t > t_0$), ahol κ a szökési ráta [1].



8. ábra: A szennyeződé felhők még a felszínre ki nem ülepedett részecskéinek aránya exponenciálisan csökken az időben.

Köszönetnyilvánítás

A munka a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj és az NKFIH PD-121305 és FK-124256 pályázatok támogatásával készült.

Hivatkozások

- [1] Haszpra, T., Tél, T.: Escape rate: a Lagrangian measure of particle deposition from the atmosphere, *Nonlin. Proc. Geophys.* 20(5), 2013, 867–881.
- [2] Haszpra T.: A RePLaT modell és alkalmazása légköri szennyeződések terjedésének vizsgálatára, PhD értekezés, ELTE TTK Elméleti Fizikai Tanszék, Budapest, 2014, 121 o.
- [3] Tél T. és Gruiz M.: Kaotikus dinamika, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2002, 356 o., ISBN-9789631932805.
- [4] Sutherland, W.: LII. The viscosity of gases and molecular force, *Philosophical Magazine, Series 5*, 36, 1893, 507–531.
- [5] Haszpra, T., Tél, T.: Topological entropy: a Lagrangian measure of the state of the free atmosphere. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 70(12), 2013, 4030–4040 (doi: 10.1175/JAS-D-13-069.1).
- [6] <http://www.oracle.com/technetwork/java/javase/downloads/jre8-downloads-2133155.html>
- [7] <http://apps.ecmwf.int/datasets/>
- [8] <http://nco.sourceforge.net>