

Fotokémiai szmog képződésének modellezése

Antal Krisztina, IV. évf., ELTE TTK

Témavezető(k): **Lagzi István László** tudományos munkatárs
ELTE Kémiai Intézet
Mészáros Róbert adjunktus
ELTE Meteorológiai Tanszék

Az utóbbi évtizedekben végzett vizsgálatok azt mutatták, hogy Közép-Európa és benne Magyarország az egyik legnagyobb troposzférikus ózonerhelésű területek egyike. Nyáron, az intenzív napsugárzás és a magas hőmérséklet miatt, az ózon és a többi légkörkémiai reakcióval keletkező ún. másodlagos légszennyező koncentrációja az egészségügyi határértéknél sokkal magasabb. Mindazonáltal nemcsak az emberi egészségre, hanem a természetes és a mezőgazdasági növényzetre is ártalmas. Ezért fontos az ózon terjedésének és ülepedésének minél pontosabb modellezése. Erre a feladatra a TREX terjedési–ülepedési modellt használjuk. A TREX modell korábban használt kémiai almodelljének reakciómechanizmusa 7 anyagfajttával és ugyanennyi reakcióval számol, amely a troposzférában lejátszódó kémiai folyamatok leegyszerűsített modellje.

Munkánk során egy új, részletesebb kémiai reakciómechanizmus alkalmazását tűztük ki célul, mellyel pontosíthatjuk a modellel számított ózonkoncentrációkat a mérési eredményekhez viszonyítva. A választott modell 16 anyagfajttát vesz figyelembe. Az anyagfajtták koncentrációváltozását leíró közönséges differenciálegyenletek csak implicit módon oldhatóak meg, külön integrálóprogram segítségével (CVODE). A dinamikus modellek közül a box modellt választottuk a reakciómechanizmus tesztelésére, melyben ideális keveredést tételezünk fel és a turbulenciával nem számoltunk. A légszennyezők terjedését először Lagrangi szemléletmódban vizsgáljuk, majd szeretnénk beépíteni az Euleri szemléletmódot alkalmazó TREX modellbe.