



## AZOTO OKSIDŲ IR ANGLIES MONOKSIDO SKLAIDOS ATMOSFEROJE SKAITINIS MODELIAVIMAS PAGAL *PHOENICS* PROGRAMĄ

Inga Januševičienė<sup>1</sup>, Zenonas Venckus<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>*Aplinkos apsaugos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas,  
Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, Lietuva*

<sup>2</sup>*Aplinkotyros katedra, Šiaulių universitetas,  
Vilniaus g. 88, LT-76285 Šiauliai, Lietuva*

*El. paštas: <sup>1</sup>inga.gimbutaite@gmail.com; <sup>2</sup>venckus.z@gmail.com (corresponding author)*

*[teikta 2007-06-19; priimta 2009-07-07]*

**Santrauka.** Atlikti eksperimentiniai tyrimai siekiant nustatyti į aplinkos orą išsiskiriančių dujų kiekius degant įvairių rūšių medienos kurui – malkoms, granulėms, briketams ir pjuvenoms. Dujų analizatoriumi *Testo-350* išmatuotos degimo metu į aplinkos orą išsiskiriančių dujų – anglies monoksido (CO), azoto oksidų (NO<sub>x</sub>) koncentracijos dūmuose, deguonies (O<sub>2</sub>) kiekis, taip pat dūmų temperatūra koncentracijų matavimo vietoje. Remiantis atliktais eksperimentiniais tyrimais pagal *PHOENICS* programą sumodeliuota anglies monoksido ir azoto oksidų koncentracijos sklaida atmosferoje iš taršos šaltinio (kamino aukštis 13 m), esant tam tikrai eksperimento metu nustatytai koncentracijai. Gauti rezultatai pateikti horizontaliojoje ir vertikaliojoje plokštumose. Atlikti teršalų emisijų pažemio koncentracijos skaičiavimai pagal banguotąją ir kūgiškąją atmosferos stabilumo formas. Gauso metodu apskaičiuoti tiriamų teršalų pažemio koncentracijų maksimumai. Modeliavimo duomenys palyginti su skaičiavimų rezultatais.

**Reikšminiai žodžiai:** sklaida, taršos šaltinis, pažemio koncentracija, turbulencija, atmosferos stabilumas.

### 1. Įvadas

Oro kokybės tyrimo modeliuose, modeliuojant fizinius ir cheminius procesus, veikiančius oro teršalus, sklindančius ir reaguojančius tarpusavyje atmosferoje, taikomos matematinės ir skaitmeninės technologijos. Įvedus meteorologinius duomenis ir informaciją apie taršos šaltinį (išmetamas teršalo kiekis, kamino aukštis), taikant modelius apskaičiuojama susidaranti teršalų koncentracija. Jos vėliau palyginamos su teršalų aplinkos ore ribinėmis vertėmis (Bradshaw 1971).

Modeliai yra svarbūs kontroliuojant oro kokybę, nes juos galima naudoti konkretais šaltinio atmosferos taršos daliai nustatyti, siekiant kurti efektyvią oro kokybės gerinimo strategiją. Pavyzdžiui, oro kokybės modeliai naudojami išduodant teršalų išmetimo leidimus pramonės įmonėms, tikrinant, ar dėl naujo proceso nebus viršijamos teršalų ribinės vertės. Jeigu nustatoma, kad ribinės vertės bus viršijamos, numatomos atitinkamos taršos mažinimo priemonės (Vaitiekūnas, Banaitytė 2007).

Oro kokybės modeliai naudojami ir būsimiems teršalų išmetimams iš visų skirtingų taršos šaltinių įvertinti, pavyzdžiui, prieš taikant ir pritaikius taršos mažinimo priemones arba įdiegus siūlomus patobulinimus (Baltrėnas *et al.* 2004, 2008a; Petraitis, Vasarevičius 2001).

Esama įvairių modelių tipų – nuo demonstruojamųjų iki detalių modelių, kuriuose naudojama naujausia informacija apie atmosferos sluoksnius (naujos kartos modeliai). Demonstruojamieji modeliai dažniausiai taikomi konkrečiam atvejui ir jų paskirtis yra akivaizdi (Kiely 1997).

Pramoniniuose taršos šaltiniuose naudojami modeliai: *ADMS-Screen* (naujos kartos pramoninio oro kokybės modelio *ADMS 3* demonstruojamoji versija) ir *SCREEN 3* (senosios kartos Gauso oro kokybės modelio *ISC 3* demonstruojamoji versija). Kita modelių grupė – *PHOENICS*, *FLUENT* pagrįsti bendrųjų pernašos lygčių skaitiniu sprendimu ir nėra specializuoti aplinkos taršai modeliuoti. Šie modeliai dažniausiai sukurti ne tam pačiam tikslui – vienas jų labiau taikomas tankių dujų sklaidai, kitas – transporto išmetimams modeliuoti (Baltrėnas *et al.* 2008b).

Programa *PHOENICS* modeliuojami srautų tekėjimai, šilumos mainai, cheminės reakcijos ir su jais susiję procesai. Tokie procesai vyksta daugelyje inžinerinių įrenginių, gamtoje, gyvuosiuose organizmuose. Modeliavimas *PHOENICS* programa palengvina numatyti, suprasti įrenginių veikimą, gamtinius procesus, gyvų organizmų organų funkcijas (*PHOENICS 3.5 VR 2002*).

Darbo tikslas – sumodeliuoti iš kamino išsiskiriančių teršalų sklaidą ir palyginti su teršalų pažemio koncentracijos skaičiavimų rezultatais.

*PHOENICS* programa modeliuojama fizikinius dėsnius išreiškus matematinėmis lygtimis. Modeliavimas apima viso objekto, kuriame vyksta numatytas modeliuoti procesas, sudarymą. *PHOENICS* programa galima modeliuoti dujinių teršalų pernašą ore, skystajame pavidale (vandenyje) ir dirvoje, kietųjų dalelių pernašą (Nacionalinių taršos... 2006).

## 2. Matematinio modeliavimo metodika

Eksperimentiniams tyrimams atlikti naudotas kietojo kuro vandens šildymo katilas, skirtas įvairioms patalpoms šildyti. Katilo nominalusis galingumas 20 kW.

Bandymai atlikti remiantis Lietuvos standarto LST EN 303–5 reikalavimais. Katilo emisijos dydžiai nustatomi esant nominaliajam šilumos galingumui. Anglies monoksido (CO), azoto oksidų (NO<sub>x</sub>) koncentracijos, dūmų temperatūra ir deguonies (O<sub>2</sub>) reikšmės nustatomos per visą bandymo laikotarpį.

Eksperimento metu buvo išmatuotos anglies monoksido (CO), azoto oksidų (NO<sub>x</sub>), deguonies koncentracijos (O<sub>2</sub>) dūmuose, taip pat dūmų temperatūra koncentracijų matavimo vietoje. Kietųjų dalelių ir angliavandenilių kiekiai nematuoti. Dujinių medžiagų koncentracijų matavimai atlikti dūmų analizatoriumi Testo-350. Promilės (ppm) atitinka tūkstantą procento dalį, t. y. rodo, kokia dalis tos medžiagos yra ore (Gimbutaitė, Venckus 2008).

Bet kurią tekėjimą išsamiai nusako Navjė ir Stokso bei energijos lygtys. Fizikiniam vaizdui gauti sprendžiamos šios lygtys, tačiau šiuo metu visos Navjė ir Stokso lygčių sistemos išspręsti neįmanoma. Tai galima atlikti artutiniausiais metodais šiuolaikiniais kompiuteriais. Išsamiam fizikiniam vaizdui gauti į lygčių sistemą būtina įtraukti ir turbulencijos lygtis (Butkus 2006).

Visos diferencialinių lygčių sistemos, kurios diskretizuotąją versiją sprendžia PHOENICS, apibendrintoji forma yra tokia (Rosten, Spalding 1987; Baltrėnas *et al.* 1997):

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_i \rho_i \Phi_i) + \text{div}(r_i \vec{v}_i \Phi_i - r_i \Gamma_i \text{grad} \Phi_i) = r_i S_{\Phi_i}, \quad (1)$$

čia:  $t$  – laikas,  $r$  – fazės  $i$  tūrinė dalis,  $\rho_i$  – fazės  $i$  tankis,  $\Phi_i$  – fazės  $i$  priklausomasis kintamasis (koncentracija, entalpija, momentas masės vienetui, cheminio reagento masės dalis ir kt.),  $\vec{v}_i$  – fazės  $i$  greičio vektorius,  $\Gamma_{\Phi_i}$  – kintamojo  $\Phi_i$  mainų koeficientas,  $S_{\Phi_i}$  – kintamojo  $\Phi_i$  srauto narys.

Iš bendrosios tipo lygties galima gauti uždaviniui spręsti reikiamą lygtį arba lygčių sistemą. Pavyzdžiui, fazės nenutrūkstamumo lygtis gaunama vietoje  $\Phi_i$  įrašius 1:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_i \rho_i) + \text{div}(r_i \vec{v}_i \rho_i) = r_i S_i, \quad (2)$$

čia  $S$  – masės šaltinis.

Ši lygtis nusako esamą laiko momentą ir yra laminariojo proceso. Turbulentinio proceso lygtis vidurkinama pagal laiką (Butkus 2006).

Turimas vienfazis srautas, tokiu atveju masės tūrio dalis  $r_i = 1$  išnyksta. Kadangi procesas yra pastovus, tai narys, kuris priklauso nuo laiko  $[\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Phi) = 0]$  taip pat dingsta.

Vienfazio srauto diferencialinė lygtis, kai procesas nuostovus (Rhie, Chow 1983):

$$\text{div}(\rho_i \vec{v}_i \cdot \Phi_i - \Gamma_{\Phi_i} \cdot \text{grad} \Phi_i) = S_{\Phi_i}, \quad (3)$$

čia:  $\rho_i$  – fazės  $i$  tankis;  $\vec{v}_i$  – fazės  $i$  greičio vektorius;  $\Phi_i$  – fazės  $i$  priklausomasis kintamasis kaip entalpija, momentas masės vienetui, turbulentiškumo energija ir kt.;  $\Gamma_{\Phi_i}$  – kintamojo  $\Phi_i$  mainų koeficientas;  $S_{\Phi_i}$  – kintamojo  $\Phi_i$  srauto narys.

Gaunama uždaviniui spręsti reikiama lygčių sistema. Ji sprendžiama skaitiniu baigtinių tūrių metodu pagal atitinkamas tam uždaviniui būdingas ribines sąlygas (Mathiesen, Solberg 1999).

Sprendžiamas trimatis teršalų (CO ir NO<sub>x</sub>) sklaidimo aplinkoje uždavinys. Modeliuojamas anglies monoksido ir azoto oksidų pasklidimas aplinkos ore. Modeliavimui duomenys gauti eksperimento metu (teršalų koncentracija emisijos šaltinyje: anglies monoksido – 5000 mg/m<sup>3</sup>, azoto oksidų – 285 mg/m<sup>3</sup>).

Uždaviniui spręsti įvedami situaciniai duomenys:

- taršos šaltinis – kaminas, kurio aukštis 13 m;
- kamino išmetimo angos skersmuo – 0,5 m;
- degimo produktų išmetimo greitis – 2,5 m/s;
- teršalus išsklaidančio vėjo greitis – 5 m/s;
- laisvojo kritimo pagreitis – 9,81 m/s<sup>2</sup>.

Modelio erdvė sudaryta pagal Dekarto koordinatų sistemą. Modelio ilgis ( $z$  ašis) 300 m, plotis ( $x$  ašis) 50 m, aukštis ( $y$  ašis) 50 metrų. Taršos šaltinis koordinatų sistemos pradžioje.

Skaičiuojamoji modelio erdvė, kad skaičiavimo duomenys būtų gauti tikslūs, sugraduojama tinkleliu vertikalojoje ir horizontaliojoje plokštumose. Tinklelis sutankintas ties kaminu, siekiant išryškinti teršalų koncentracijos pokyčius didėjant atstumui nuo kamino.

## 3. Modeliavimo rezultatai ir jų analizė

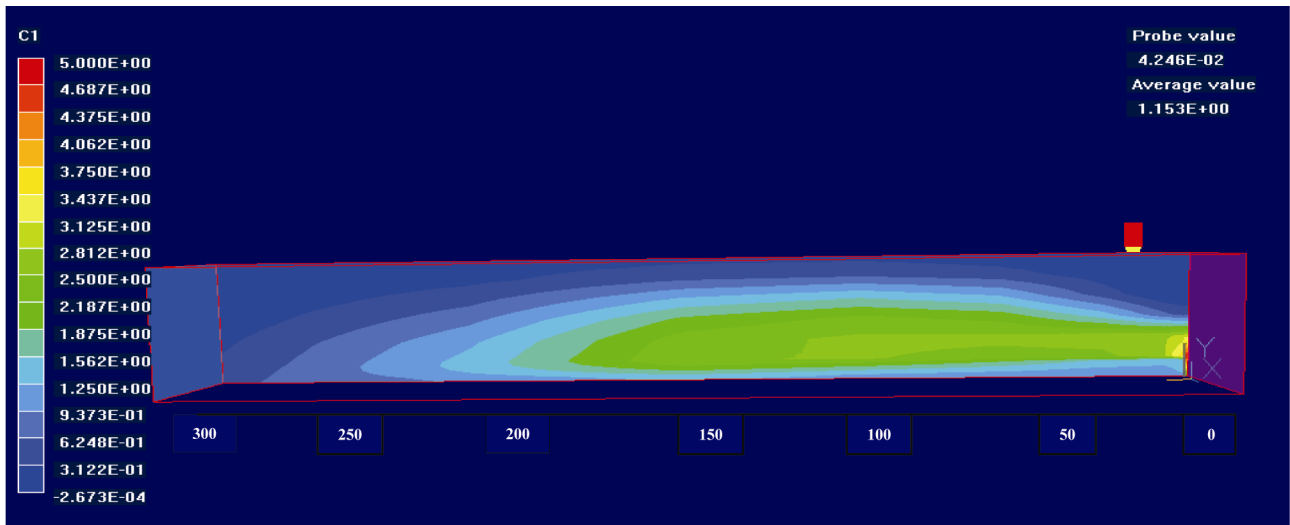
Sumodeliuoti teršalų koncentracijų „debesys“ pavaizduoti 1–4 paveiksluose.

Atlikus anglies monoksido sklaidos modeliavimą, vertikaliajame pjūvyje (1 pav.) matomas susidarantis išmetamų anglies monoksido teršalų fakelas.

Pjūvis daromas vertikaliai nuo kamino viršaus iki apačios, kad geriau būtų matoma teršalų sklaida. Anglies monoksido didžiausioji koncentracija yra prie kamino angos, tik šiek tiek pasislinkusi  $x$  kryptimi. Nusidriekusio anglies monoksido fakelo ilgis – 300 metrų.

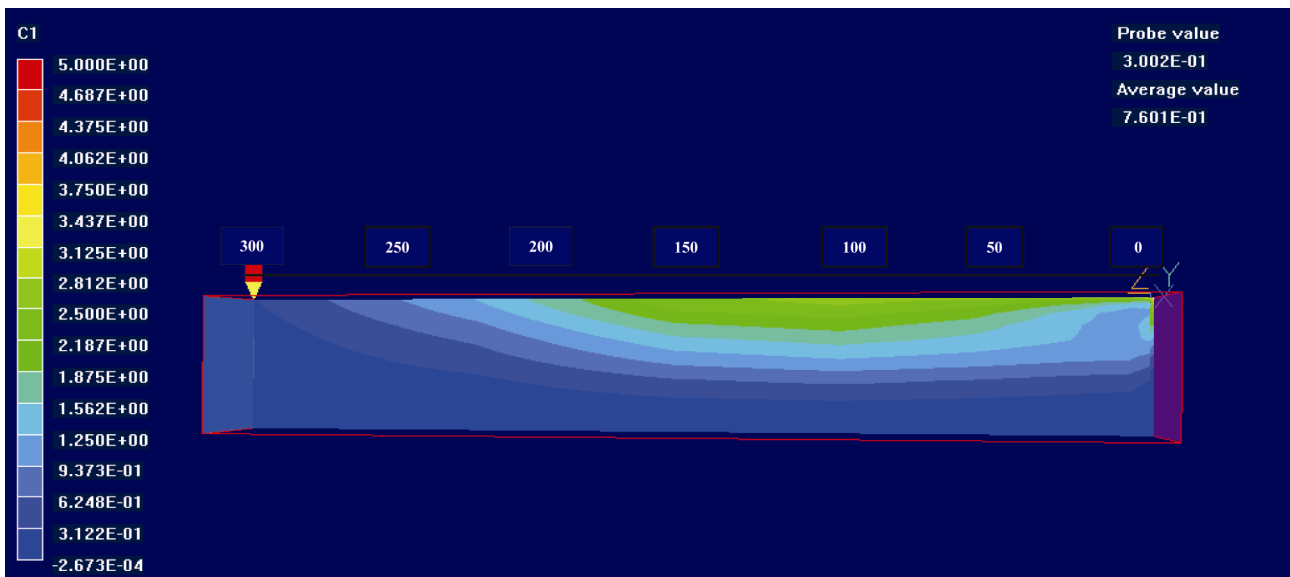
Prie pat kamino pažemio anglies monoksido koncentracija yra 2,057 mg/m<sup>3</sup>. Per 10 m nuo kamino koncentracija sumažėja iki 1 mg/m<sup>3</sup>. Nutolus nuo kamino per 20 m, koncentracija pradeda didėti ir siekia 1,055 mg/m<sup>3</sup>. 100 m atstumu nuo kamino anglies monoksido koncentracija 1,114 mg/m<sup>3</sup>. Didžiausia pažemio koncentracija yra 150 m atstumu nuo kamino ir siekia 1,264 mg/m<sup>3</sup>. Atlikus teorinius skaičiavimus, maksimali anglies monoksido pažemio koncentracija (1,008 mg/m<sup>3</sup>) nustatyta 130 m atstumu nuo kamino, esant C klasės atmosferos stabilumui, ir 200 m atstumu (1,008 mg/m<sup>3</sup>), kai atmosferos stabilumas D klasės.

Tolstant nuo ten, kur pažemio koncentracija maksimali, koncentracija pradeda mažėti ir 200 m atstumu siekia 1,067 mg/m<sup>3</sup>. Pagal skaičiavimus – 0,741 mg/m<sup>3</sup> (kai atmosferos stabilumas C) ir 1,008 mg/m<sup>3</sup> (kai atmosferos



1 pav. Anglies monoksido sklaidos pjūvis vertikalojoje plokštumoje (x ašyje)

Fig. 1. Carbon monoxide dispersion cross-section in a vertical plane (in x axis)



2 pav. Anglies monoksido sklaidos pjūvis horizontaliojoje plokštumoje (y ašyje)

Fig. 2. Carbon monoxide dispersion cross-section in a horizontal plane (in y axis)

stabilumas D). 250 m atstumu nuo kamino koncentracija pagal modelį yra  $0,719 \text{ mg/m}^3$ , apskaičiuotoji –  $0,206 \text{ mg/m}^3$  (atmosferos stabilumas C) ir  $1 \text{ mg/m}^3$  (atmosferos stabilumas D). Tolstant nuo kamino koncentracija tolygiai mažėja ir už 300 m siekia tik  $0,285 \text{ mg/m}^3$ . Koncentracijos mažėjimo priežastis – anglies monoksido teršalų maišymasis su atmosferos oru.

Didžiausias fakelo aukštis vertikalojoje plokštumoje, fiksuotas 115 m atstumu nuo kamino, buvo apie 40 metrų. Anglies monoksido sklaida virš kamino išmetimo angos fiksuota 25 m aukštyje.

Anglies monoksido koncentracijos sklaidos analizė horizontaliojoje plokštumoje daryta kamino pjūvyje 13 m aukštyje, nes ties šiuo aukščiu yra pagrindinis teršalų debesis (2 pav.).

Sklaida į šonus nėra didelė, pagrindinė teršalų masė nunešama pavėjui. Visa tai lemia sumodeliuotas šoninis vėjas. 2 pav. matyti, kad didžiausias fakelo plotis nuo centrinės ašies yra apie 40 m. Fakelas driekiasi 140 m nuo kamino. Toliau debesis pradeda siaurėti ir ties 210 m žyma siekia 24 m, ties 267 m žyma – 19 m, o 300 m nuo kamino akivaizdi jo riba.

Didžiausia anglies monoksido koncentracija y ašyje –  $2,49 \text{ mg/m}^3$  yra per 124 m nuo kamino.

Pagal azoto oksidų sklaidos modelį teršalų sklaidos fakelas pateikiamas 3 paveiksle.

Vertikaliajame pjūvyje matomas išmetamų azoto oksidų teršalų fakelas. Pjūvis daromas 13 m aukštyje, kad geriau būtų matoma teršalų sklaida. Azoto oksidų didžiausia koncentracija, kaip ir tiriant anglies monoksido sklaidą, yra prie kamino angos, ir debesis taip pat yra

pasislinkęs  $x$  kryptimi. Azoto oksidų fakelas nusidriekęs 300 metrų. Prie pat kamino azoto oksidų pažemio koncentracija yra  $0,117 \text{ mg/m}^3$ . Nutolus nuo kamino 10 m, koncentracija sumažėja iki  $0,062 \text{ mg/m}^3$ , o 30 m – iki  $0,058 \text{ mg/m}^3$ . Per 40 m nuo kamino koncentracija pradeda nežymiai didėti ir siekia  $0,059 \text{ mg/m}^3$ . 100 m atstumu nuo kamino azoto oksidų koncentracija  $0,063 \text{ mg/m}^3$ .

Didžiausioji azoto oksidų pažemio koncentracija, kaip ir anglies monoksido, yra 150 m atstumu nuo kamino ir siekia  $0,072 \text{ mg/m}^3$ . Pagal atliktus teorinius skaičiavimus maksimali azoto oksidų pažemio koncentracija nustatyta 130 m atstumu nuo kamino ( $0,053 \text{ mg/m}^3$ ), kai atmosferos stabilumas C, ir 200 m atstumu ( $0,053 \text{ mg/m}^3$ ), kai atmosferos stabilumas D.

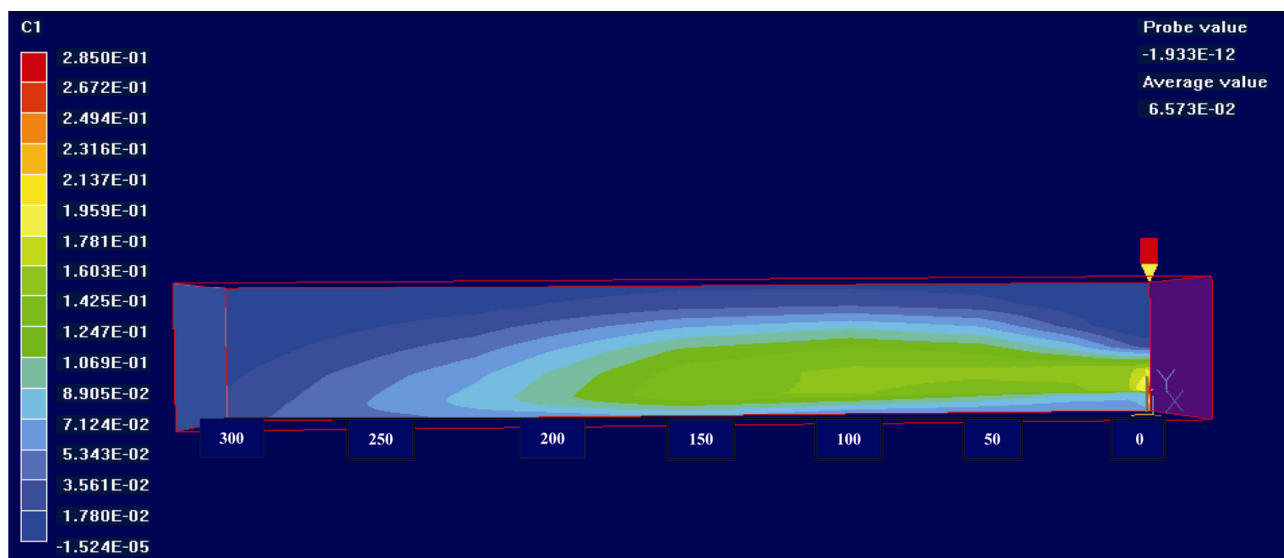
Tolstant nuo tos vietos, kur azoto oksidų pažemio koncentracija maksimali, koncentracija pradeda mažėti ir

200 m atstumu siekia  $0,061 \text{ mg/m}^3$ . Pagal skaičiavimus –  $0,039 \text{ mg/m}^3$  (kai atmosferos stabilumas C) ir  $0,053 \text{ mg/m}^3$  (kai atmosferos stabilumas D). Ties 250 m riba koncentracija modeliuojant yra  $0,047 \text{ mg/m}^3$ , apskaičiuotosios –  $0,031 \text{ mg/m}^3$  (atmosferos stabilumas C) ir  $0,053 \text{ mg/m}^3$  (atmosferos stabilumas D).

Dar toliau nuo kamino koncentracija palaipsniui mažėja ir už 300 m nuo kamino siekia tik  $0,032 \text{ mg/m}^3$ .

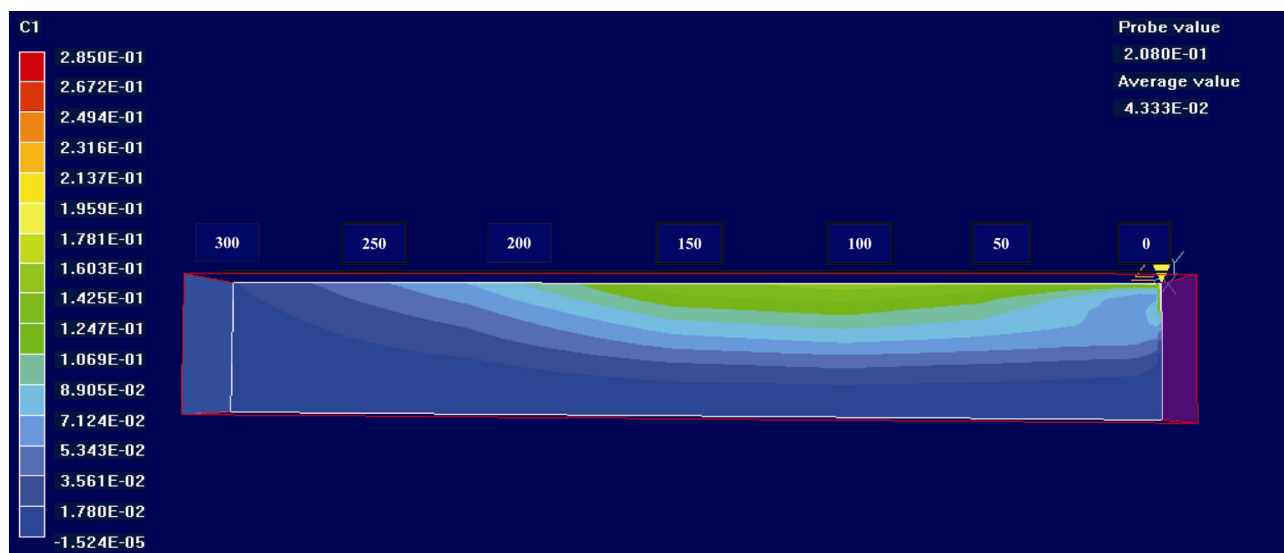
Didžiausias fakelo aukštis vertikaliuojuose plokštumoje fiksuotas 115 m atstumu nuo kamino – apie 40 m. Azoto oksidų sklaida virš kamino išmetimo angos fiksuojama 25 m aukštyje.

Analizuojant azoto oksidų koncentracijos sklaidą horizontaliajame pjūvyje (4 pav.) matyti, kad 13 m aukštyje didžiausias fakelo plotis nuo centrinės ašies yra apie 43 m 100 m atstumu nuo kamino.



3 pav. Azoto oksidų sklaidos pjūvis vertikaliuojuose plokštumoje ( $x$  ašyje)

Fig. 3. Nitrogen oxides dispersion cross-section in a vertical plane (in  $x$  axis)



4 pav. Azoto oksidų sklaidos pjūvis horizontaliojuose plokštumoje ( $y$  ašyje)

Fig. 4. Nitrogen oxides dispersion cross-section in a horizontal plane (in  $y$  axis)

Toliau debesis pradeda siaurėti ir per 210 m nuo kamino siekia 30 m, per 260 m – 20 m, o per 300 m atstumu nuo kamino – debesies riba. Didžiausia azoto oksidų koncentracija  $y$  ašyje yra per 73 m nuo kamino ir siekia  $0,143 \text{ mg/m}^3$ .

**4. Teršalų pažemio koncentracijos skaičiavimai**

Teršalų sklaidimo aplinkoje uždavinys gali būti sprendžiamas kaip difuzijos lygties judančioje aplinkoje uždavinys. Laikant, kad fluidas, kuriame vyksta difuzija, yra nespūdis ir juda pastoviuoju greičiu  $U$ , difuzijos lygtis užrašoma taip (Vaitiekūnas, Špakauskas 2003):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (UV)c - D\nabla^2 c = f(r,t), \quad (4)$$

čia  $f(r,t)$  – šaltinio funkcija.

Sprendžiant teršalų sklaidimo iš kamino uždavinį daromos šios prielaidos:

1. Vėjo pernešama masė daug didesnė už difuzijos proceso metu pernešamą masę:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial D_x c}{\partial x} \right) \rightarrow 0.$$

2. Procesas pastovusis:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0.$$

3. Vėjo greitis pastovusis:  $u = \text{const.}$

4. Difuzijos koeficientai pastovieji:

$$D_x, D_y, D_z = \text{const.}$$

5. Šaltinio funkcija lygi nuliui:  $f(r,t) = 0$ .

Gaunama lygtis:

$$u \frac{\partial}{\partial x} (c) = D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}. \quad (5)$$

Šios lygties analizinis sprendinys yra:

$$c(x,y,z) = \frac{Q}{2\pi \cdot x \cdot (D_y D_z)^{\frac{1}{2}}} e^{-\left(\frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right) \frac{u}{4x}}. \quad (6)$$

Šis sprendinys turi dvigubąją Gauso pasiskirstymo formą:

$$f(x,y,z) = \frac{1}{2\pi\sigma_y\sigma_z} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}}. \quad (7)$$

Pažemio koncentracija vėjo kryptimi gaunama, kai  $z = 0$ , ir apskaičiuojama:

$$c(x,y,0) = \frac{Q}{\pi \cdot u \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z} \cdot e^{-\frac{H^2}{2\sigma_z^2}}, \quad (8)$$

čia  $Q$  – taršos šaltinio per 1 s išmetama masė (gauta eksperimentinių tyrimų metu);  $u$  – vėjo greitis kamino aukštyje, m (vyravęs eksperimentinio tyrimo diena);  $\sigma_y$  – dispersija vertikaliaja kryptimi (5 pav.), m;  $\sigma_z$  – dispersija horizontaliaja kryptimi, m;  $H$  – kamino aukštis, m.

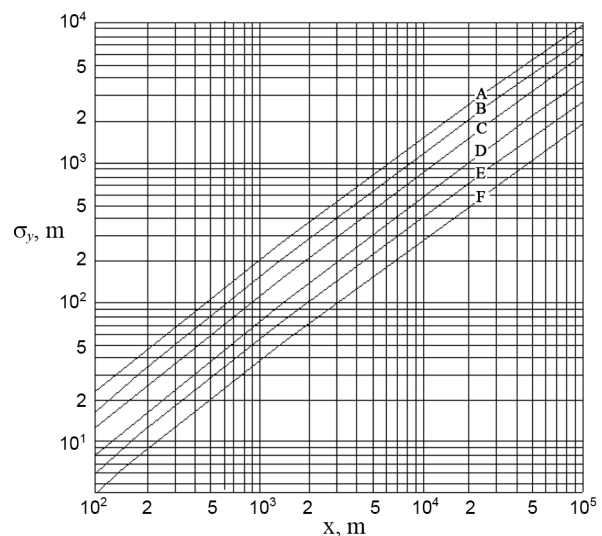
Šį analizinį sprendinį naudosime keliems atvejams – įvertinsime pažemio koncentraciją centrinėje linijoje, kai atmosferos stabilumas C ir D.

C atmosferos stabilumas – banguotoji forma, kai yra giedra vasaros diena, stipri turbulencija ir konvekcija.

D atmosferos stabilumas – kūgiškoji forma, įvairiu metu ir paros laiku, kai vėjuota, stratifikacija artima neutraliai (Laškova et al. 2007).

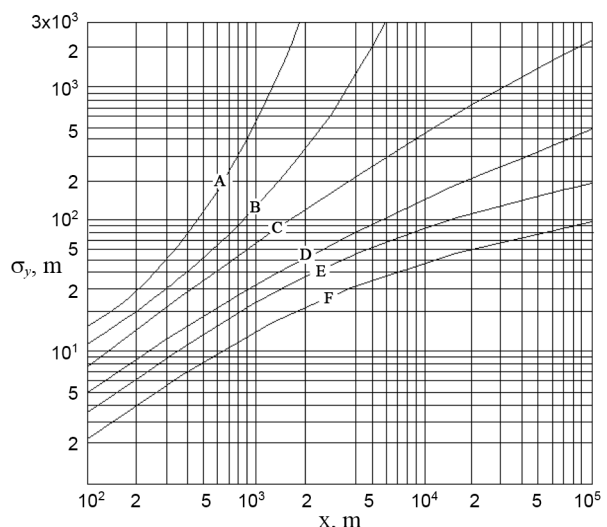
Žinant kamino aukštį  $H$  (13 m), randama dispersija  $\sigma_z$  (Vaitiekūnas 2007)

$$\sigma_z = \frac{H}{\sqrt{2}} = 0,707H = 0,707 \cdot 13 = 9,191 \text{ m.}$$



**5 pav.** Standartinis nuokrypis  $\sigma_y$ , m (Vaitiekūnas, Špakauskas 2003)

**Fig. 5.** Standard deviation  $\sigma_y$ , m (Vaitiekūnas, Špakauskas 2003)



**6 pav.** Standartinis nuokrypis  $\sigma_z$ , m (Vaitiekūnas, Špakauskas 2003)

**Fig. 6.** Standard deviation  $\sigma_z$ , m (Vaitiekūnas, Špakauskas 2003)

Iš  $\sigma_z$  priklausomybės nuo  $x$  grafiko, atsižvelgiant į meteorologines sąlygas (C ir D atmosferos stabilumas), gaunama  $x$  reikšmė, kuri nusako maksimalios koncentracijos vietą tame taške.

Iš 6 pav. pagal C kreivę nustatoma, kad tai atitinka  $x = 130$  m. Tame taške apskaičiuojama maksimali pažemio anglies monoksido koncentracija vėjo kryptimi (Vaitiekūnas, Špakauskas 2003):

$$c_{\max}(x) = \frac{0,117Q}{u\sigma_y\sigma_z}. \quad (9)$$

Koncentracija lygi  $1,008 \text{ mg/m}^3$ . Pagal (8) formulę apskaičiuojamos anglies monoksido (CO) koncentracijos viename taške prieš maksimalią koncentraciją ir keturiuose – už maksimalios.

Tie patys veiksmai atliekami ir skaičiuojant azoto oksidų ( $\text{NO}_x$ ) koncentracijas. Gautoji azoto oksidų maksimali koncentracija  $0,053 \text{ mg/m}^3$ . Nustatytos anglies monoksido ir azoto oksidų pažemio koncentracijos reikšmės, esant C klasės atmosferos stabilumui.

Rezultatai pateikiami 1 lentelėje.

**1 lentelė.** Skaičiavimo duomenys, kai atmosferos stabilumas C klasės

**Table 1.** Calculation data at atmospheric stability C

Atstumas, m	100	130	150	200	250	300
Anglies monoksidas, $\text{mg/m}^3$	0,771	1,008	1,081	0,741	0,206	0,436
Azoto oksidai, $\text{mg/m}^3$	0,04	0,053	0,057	0,039	0,03	0,022

Iš  $\sigma_z$  priklausomybės nuo  $x$  grafiko, atsižvelgiant į atmosferos stabilumą D, gaunama  $x$  reikšmė, nusakanti maksimalios koncentracijos vietą tame taške, – 200 metrų. Tame taške pagal (6) formulę apskaičiuojama maksimali pažemio azoto oksidų ( $\text{NO}_x$ ) koncentracija vėjo kryptimi. Ji lygi  $0,053 \text{ mg/m}^3$ .

Apskaičiuojamos azoto oksidų ( $\text{NO}_x$ ) koncentracijos trijuose taškuose prieš maksimalią koncentraciją ir dviejuose – už maksimalios. Tie patys veiksmai atliekami ir skaičiuojant anglies monoksido (CO) koncentracijas. Anglies monoksido maksimali koncentracija  $0,04 \text{ mg/m}^3$ . Rezultatai pateikti 2 lentelėje.

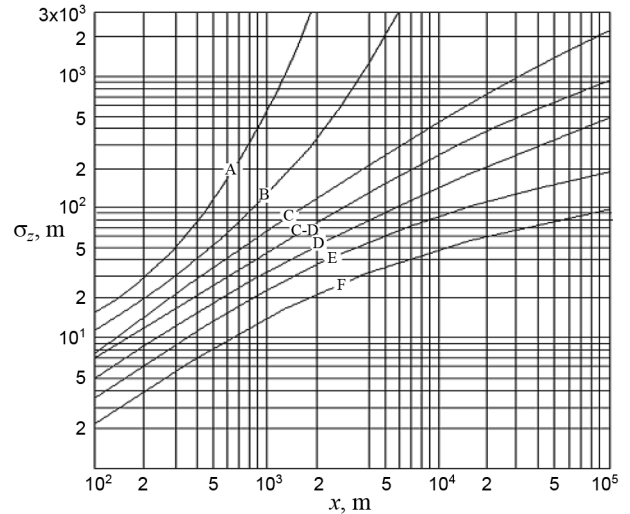
**2 lentelė.** Skaičiavimo duomenys, kai atmosferos stabilumas D klasės

**Table 2.** Calculation data at atmospheric stability D

Atstumas, m	100	130	150	200	250	300
Anglies monoksidas, $\text{mg/m}^3$	0,321	0,685	0,848	1,008	1	0,735
Azoto oksidai, $\text{mg/m}^3$	0,016	0,035	0,048	0,053	0,052	0,041

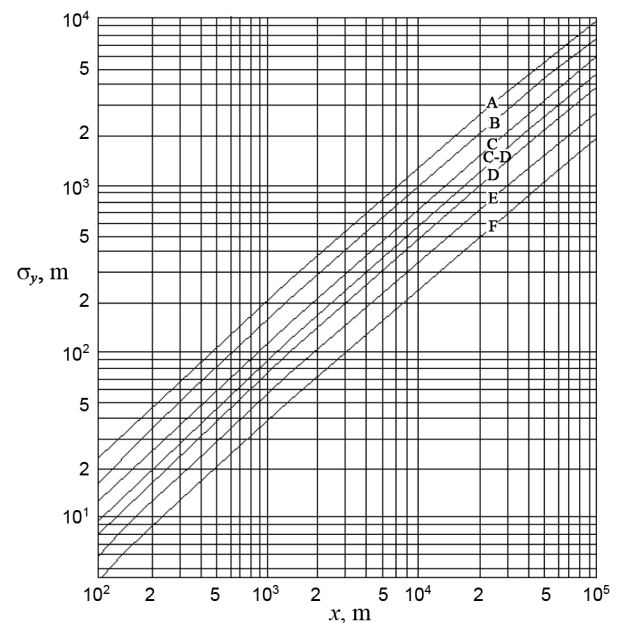
## 5. Modeliavimo ir skaičiavimo rezultatų palyginimas

Apskaičiavus pagal Gauso pasiskirstymą taikant C klasės atmosferos stabilumą, maksimali išsiskiriančių teršalų pažemio koncentracija gauta 130 m atstumu nuo kamino, o skaičiavimams taikant D klasės atmosferos stabilumą – per 200 m nuo kamino. Teršalų sklaidą tiriant pagal PHOENICS modeliavimo programą, šis atstumas gautas 150 m nuo kamino. Kadangi apskaičiavus pagal Gauso pasiskirstymą ir sumodeliavus pagal PHOENICS programą gaunami nukrypimai, siūloma išvesti papildomą standartinio nuokrypio kreivę tarp C ir D atmosferos stabilumų (7, 8 pav.).



**7 pav.** Standartinis nuokrypis  $\sigma_z$ , m su papildoma C – D kreive

**Fig. 7.** Standard deviation  $\sigma_z$ , m with an additional curve C – D



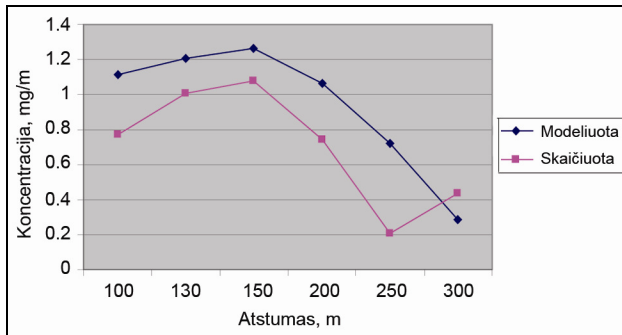
**8 pav.** Standartinis nuokrypis  $\sigma_y$ , m su papildoma C – D kreive

**Fig. 8.** Standard deviation  $\sigma_y$ , m with an additional curve C – D

Teršalų sklaidos modeliavimo ir skaičiavimo pažemio koncentracijų duomenims palyginti atlikti skaičiavimai pagal formulę

$$\varepsilon = \frac{v_{\max} - v_{\min}}{v_{\max}} \cdot 100 \% \quad (10)$$

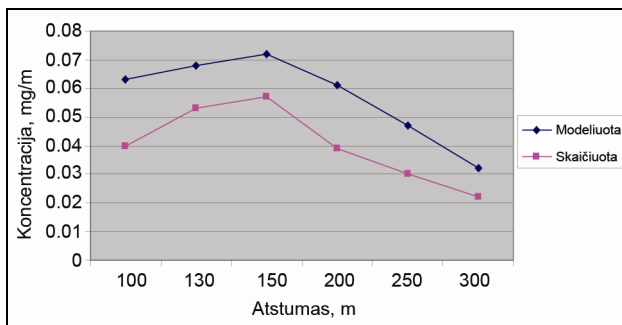
Skirtingų teršalų koncentracijų skaičiavimų rezultatams esant įvairių klasių atmosferos stabilumui pavaizduoti grafiškai 9–12 paveiksluose.



**9 pav.** CO modeliavimo ir skaičiavimų rezultatų palyginimas, kai atmosferos stabilumas C klasės

**Fig. 9.** CO modeling data comparison with those calculated ones at atmospheric stability C

Analizuojant nustatyta, kad vidutinis duomenų nesutapimas yra 32,9 %. Didžiausias duomenų nesutapimas gautas 250 m atstumu (71,3 %). Mažiausias – 150 m atstumu nuo kamino (14,4 %).



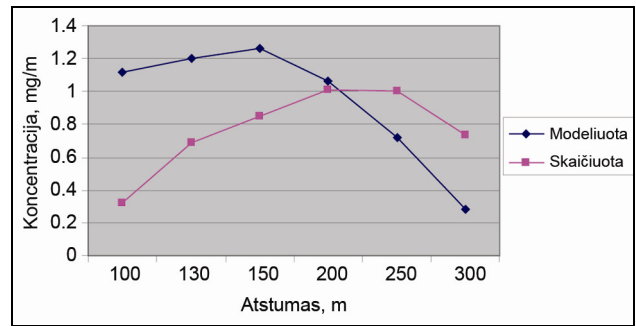
**10 pav.** NO<sub>x</sub> modeliavimo ir skaičiavimų duomenų palyginimas, kai atmosferos stabilumas C klasės

**Fig. 10.** NO<sub>x</sub> modeling data comparison with those calculated ones at atmospheric stability C

Iš 10 pav. matome, kad didžiausias duomenų nesutapimas gautas 200 m atstumu (36,1 %), o mažiausias – 150 m atstumu nuo kamino (20,8 %). Vidutinis duomenų nesutapimas yra 29,8 %.

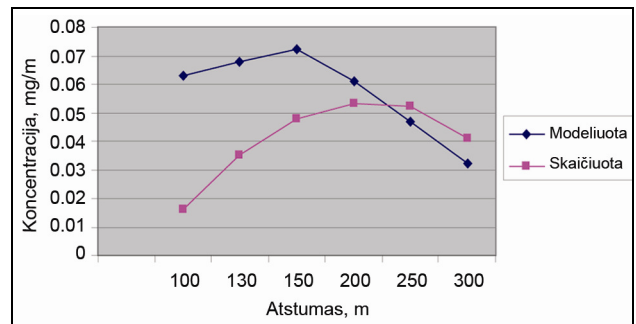
Iš 11 pav. matyti, kad didžiausias duomenų nesutapimas nustatytas 100 m atstumu (71,2 %). Mažiausias – 200 m atstumu (5,5 %). Vidutinis duomenų nesutapimas yra 40,3 %.

Iš 12 pav. matome, kad didžiausias duomenų nesutapimas yra 100 m atstumu (74,6 %). Mažiausias – 250 m atstumu (9,6 %). Vidutinis duomenų nesutapimas – 33,5 %.



**11 pav.** CO modeliavimo rezultatų palyginimas su apskaičiuotais, kai atmosferos stabilumas D klasės

**Fig. 11.** CO modeling data comparison with those calculated ones at atmospheric stability D



**12 pav.** NO<sub>x</sub> modeliavimo rezultatų palyginimas su apskaičiuotais, kai atmosferos stabilumas D klasės

**Fig. 12.** NO<sub>x</sub> modeling data comparison with those calculated ones at atmospheric stability D

Nustatyti gana dideli duomenų nesutapimai. Tai gali būti dėl modeliavimo ir skaičiavimo metu neįvertintų esamų pastatų, meteorologinių sąlygų. Norint gauti tikslesnius rezultatus, reikėtų visa tai įvertinti, kartu dar pataikinant skaičiuojamojo modelio erdvės tinklėlį.

## 6. Išvados

1. Atlikus anglies monoksido sklaidos modeliavimą vertikaliajame pjūvyje, didžiausia teršalo koncentracija nustatyta prie kamino angos.

Prie pat kamino anglies monoksido pažemio koncentracija yra 2,057 mg/m<sup>3</sup>. Toliau ji tolygiai mažėja. Per 20 m nuo kamino koncentracija pradeda nežymiai didėti ir siekia 1,055 mg/m<sup>3</sup>. Maksimali pažemio koncentracija yra 150 m atstumu nuo kamino – 1,264 mg/m<sup>3</sup>.

Tolstant nuo ten, kur anglies pažemio koncentracija maksimali, koncentracija vėl pradeda mažėti. Taip atsitinka dėl anglies monoksido teršalų maišymosi su atmosferos oru.

Didžiausias fakelo aukštis, 40 m, vertikalojoje plokštumoje fiksuotas 115 m atstumu nuo kamino.

2. Anglies monoksido koncentracijos sklaida horizontaliajame pjūvyje į šonus nėra didelė. Pagrindinė teršalų masė nunešama pavėjui. Visa tai lemia sumodeliuotas šoninis vėjas. Didžiausias fakelo plotis nuo centrinės ašies yra apie 40 m, fakelas nuo kamino driekiasi 140 metrų. Didžiausia anglies monoksido koncentracija y ašyje yra per 124 m nuo kamino – 2,49 mg/m<sup>3</sup>.

3. Azoto oksidų didžiausia koncentracija, kaip ir ištyrus anglies monoksido sklaidą, yra prie kamino angos. Maksimali pažemio koncentracija, kaip ir anglies monoksido, nustatyta per 150 m nuo kamino – 0,072 mg/m<sup>3</sup>.

Fakelo didžiausias aukštis, 40 m, vertikaliuoje plokštumoje fiksuotas 115 m atstumu nuo kamino. Azoto oksidų sklaida virš kamino išmetimo angos fiksuojama 25 m aukštyje.

4. Analizuojant azoto oksidų koncentracijos sklaidą horizontaliajame pjūvyje pastebėta, kad didžiausias, 43 m, fakelo plotis nuo centrinės ašies yra 100 m atstumu nuo kamino.

Didžiausia azoto oksidų koncentracija y ašyje nustatyta 73 m atstumu nuo kamino – 0,143 mg/m<sup>3</sup>.

5. Apskaičiavus anglies monoksido ir azoto oksidų pažemio koncentracijas pagal Gauso metodą gauta, kad maksimali pažemio koncentracija centrinėje linijoje vėjo kryptimi, kai atmosferos stabilumas C klasės, yra 130 m atstumu nuo kamino, o kai D, – 200 m atstumu. Sumodeliavus PHOENICS programa šis atstumas yra 150 m atstumu nuo kamino. Tam tikslui išvesta papildoma standartinio nuokrypio kreivė tarp C ir D atmosferos stabilumų.

## Literatūra

- Baltrėnas, P.; Morkūnienė, P.; Vaitiekūnas, P. 2008a. Mathematical simulation of solide particle dispersion in the air of Vilnius city, *Journal of Environmental Engineering and Landscape Management* 16(1): 15–22. doi:10.3846/1648-6897.2008.16.15-22
- Baltrėnas, P.; Špakauskas, P.; Vaitiekūnas, P. 1997. Sunkiųjų kalibruotų aerolių dispersijos skaitinis modeliavimas, *Aplinkos inžinerija* [Environmental Engineering]. Vilnius: Technika 8(2): 4–12.
- Baltrėnas, P.; Vaitiekūnas, P.; Vasarevičius, S.; Jordaneh, S.; 2008b. Automobilių išmetamų dujų sklaidos modeliavimas, *Journal of Environmental Engineering and Landscape Management* 16(2): 65–75. doi:10.3846/1648-6897.2008.16.65-75
- Baltrėnas, P.; Vasarevičius, S.; Masilevičius, R.; Petraitis, E. 2004. *Atmosferos apsauga šiluminėje energetikoje*. Vilnius: Technika. 195 p.
- Bradshaw, P. 1971. *An Introduction to Turbulence and its Measurement*. Pergamon, Oxford. 218 p.
- Butkus, D. 2006. *Jonizuojančioji spinduliuotė aplinkoje*. Vilnius: Technika. 292 p.
- Gimbutaitė, I.; Venckus, Z. 2008. Air pollution burning different kinds of wood in small power boilers, *Journal of Environmental Engineering and Landscape Management* 16(2): 97–103. doi:10.3846/1648-6897.2008.16.97-103
- Kiely, G. 1997. *Environment Engineering*. McGraw-Hill. 975 p.
- Laškova, T.; Zabukas, V.; Vaitiekūnas, P. 2007. Meteorologinių sąlygų įtaka lakiųjų organinių junginių sklaidai pažemės atmosferos sluoksnyje, *Journal of Environmental Engineering and Landscape Management* 15(3): 135–143.
- Mathiesen, V.; Solberg, T. 1999. Gas/Particle two-phase flow modelling of a circulating fluidized bed using kinetic theory for granular flow, *The PHOENICS Journal Computational Fluid Dynamics and Its Applications* 12(2): 111–157.
- Nacionalinių taršos mažinimo bei oro kokybės vertinimo programų paruošimas. Aplinkos oro kokybės vertinimo vadovas*. Vilnius, 2006.
- Petraitis, E.; Vasarevičius, S. 2001. Kietųjų dalelių sklaidos atmosferoje skaitinis modeliavimas taikant VARSA ir PHOENICS programas, *Aplinkos inžinerija* [Environmental Engineering] 9(1): 23–28.
- PHOENICS 3.5 VR. 2002 [interaktyvus], [žiūrėta 2008 01 10]. Prieiga per internetą: <http://www.cham.co.uk>.
- Rhie, C. M; Chow, W. L. 1983. The numerical study of turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, *AIAA J*, 21: 1527–1532. doi:10.2514/3.8284
- Rosten, H. I.; Spalding, D. B. 1987. *Shareware PHOENICS. Beginner's Guide*. CHAM TR 100, CHAM Ltd., London. 262 p.
- Vaitiekūnas, P. 2007. *Šilumos mainų matematinis modeliavimas*. Vilnius: Technika. 292 p.
- Vaitiekūnas, P.; Banaitytė, R. 2007. Modeling of motor transport exhaust dispersion, *Journal of Environmental Engineering and Landscape Management* 15(1): 39–46.
- Vaitiekūnas, P.; Špakauskas, V. 2003. *Šilumos ir masės pernašos procesų aplinkoje modeliavimo principai*. Vilnius: Technika. 194 p.

## THE NUMERICAL MODELING OF NITROGEN OXIDES AND COAL MONOXIDE IN THE ATMOSPHERE, WHEN APPLYING PHOENICS PROGRAMME

I. Januševičienė, Z. Venckus

### Abstract

An experimental research has been performed during which different kinds of wood – fire wood, granules, briquettes and sawdust – were used for defining the gas quantities emitted in the atmosphere. During the test, when applying the analyser Test-350, it was measured the concentrations of carbon monoxide (CO), nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>) in the fumes, the quantity of oxygen (O<sub>2</sub>) and fume temperature in the measuring place. According to the performed experimental investigations (by using PHOENICS programme), the diffusion of carbon monoxide and nitrogen oxides concentration in the atmosphere from the pollution source has been modeled (the height of the chimney was 13 m). The results are presented in horizontal and vertical planes. The lower level concentration calculating was performed by applying the wavy and conical forms of atmospheric stability. The maxima of investigated concentrations have been found by Gauss method. The modeling data are compared with the results obtained by calculations.

**Keywords:** atmospheric stability, dispersion, pollution source, turbulence.



## ЧИСЛОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЙНИЯ В АТМОСФЕРЕ ОКИСЕЙ АЗОТА ( $\text{NO}_x$ ) И УГЛЕРОДА ( $\text{CO}$ ) С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ *PHOENICS*

**И. Янушявичене, З. Венцкус**

### Резюме

Проведены экспериментальные исследования, во время которых прибором Test-350 измерялись концентрации эмиссий  $\text{CO}$  и  $\text{NO}_x$ , выделяемых при сжигании древесного топлива. По данным эксперимента с помощью программы *PHOENICS* построена модель рассеяния концентраций эмиссий  $\text{CO}$  и  $\text{NO}_x$  в атмосфере из источника эмиссии при высоте дымовой трубы в 13 м. Полученные результаты представлены в горизонтальном и вертикальном сечениях. Вычислены концентрации газовых эмиссий над поверхностью земли на разном расстоянии от места выброса и установлены их минимумы. При вычислении максимальных надземных концентраций изучаемых эмиссий использован метод Гаусса. Проведен сравнительный анализ результатов вычислений и моделирования.

**Ключевые слова:** рассеяние, источник эмиссии, приземная концентрация, турбулентия, стабильность атмосферы.

**Inga JANUŠEVIČIENĖ.** Master student (since 2004–2008), Dept of Environmental Protection at Vilnius Gediminas Technical University (VGTU). Bachelor of Science (environmental engineering) at Šiauliai University, 2005. Publications: author of 1 scientific publication. Research interests: environmental protection.

**Zenonas VENCKUS.** Dr, Dept of Environmental Protection, Vilnius Gediminas Technical University (VGTU). Doctor of Natural Sciences (biology, botany), Institute of Botany, 1991. First degree in Forestry, Lithuanian Academy of Agriculture, 1959. Employment: lecturer in Šiauliai University and VGTU. Former employment: forester in Ministry of Environment, 1994–2001.

Publications: author of over 50 scientific publications. Research interests: environmental protection, environmental law.