

### 3. Uitgebreide modelbeschrijving

In het navolgende wordt een gedetailleerde beschrijving van het model gegeven. Allereerst zal beschreven worden op welke wijze de atmosferische parameters worden afgeleid. Dit betreft de belangrijke schalingsparameters  $L$  en  $u^*$ , tezamen met de grenslaaghoogte. Dan worden formules voor het windprofiel gegeven. Even belangrijk zijn de hoogte-afhankelijke turbulentieparameters  $\sigma_v$ ,  $\sigma_w$  en de tijdschaal  $T_1$ . Daarna volgen de wat minder belangrijke parameters zoals het temperatuurprofiel en de winddraaiing in de verticale kolom.

#### 3.1 Bepaling van de Obukhov lengte $L$ en de wrijvingsnelheid $u^*$

In het oude Nationaal Model stond het begrip stabiliteitsklasse centraal. Deze klassen geven aan wat de mate van de turbulentie is, gekoppeld aan een zekere hoogte van de menglaag. In het nieuwe Nationaal Model is deze stabiliteitsklasse in principe verlaten. In plaats hiervan worden de waarden van twee belangrijke parameters berekend: de Obukhov lengte  $L$  en de wrijvingswindsnelheid  $u^*$ .

Bronbeschrijvingen zijn in de referentielijst te vinden. De belangrijkste bron is het proefschrift van Hans Erbrink over het model STACKS-v2.3 (Erbrink, 1995). De Monin - Obukhov lengteschaal hangt af van de oppervlakteparameters  $T$ ,  $u^*$ , en warmteflux  $H$ . De definitie van  $L$  is:

$$L = -\frac{T\rho_a C_p u^{*3}}{gH\kappa} \quad (3)$$

hetgeen afgerond kan worden tot:

$$L = -91000 \frac{u^{*3}}{H} \quad (4)$$

Gedurende dagsituaties kan de voelbare warmteflux  $H$  bepaald worden uit  $\alpha$  en  $T$ , terwijl tijdens nachtelijke uren de basale formule voor  $H$  is:

$$\begin{aligned} H &= \rho_a C_p \overline{w'\theta'} \\ &= -\rho_a C_p u^* \theta^* \end{aligned} \quad (5)$$

waarbij een empirische uitdrukking voor  $\theta^*$  wordt gebruikt.

Deze twee parameters  $L$  en  $u^*$  worden nergens routinematig gemeten, zodat het nodig is deze uit andere routinemetingen af te leiden.

In principe is de methode toegepast die bij KNMI is ontwikkeld en die bekend staat als de Holtslag en van Ulden (1985) methode. Deze gaat uit van het bepalen van de warmtebalans aan het aardoppervlak. Als invoergegevens zijn daarbij nodig de windsnelheid (doorgaans op 10 m hoogte gemeten), de terreinruwheidslengte en een enkel gegeven over de zoninstraling. Deze

laatste kan overdag het beste worden gegeven als de globale straling. 's Nachts wordt uitgegaan van de bewolgingsgraad, welke ook overdag gebruikt kan worden indien gegevens over de globale straling ontbreken.

Overdag wordt de netto straling berekend met:

$$Q_{net} = \frac{(1 - albedo) \cdot Q_z + 5,31 \cdot 10^{-13} \cdot T^6 - 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot T^4 + 60 \cdot N}{1,12} \quad (6)$$

Deze wordt gebruikt om de warmteflux H te berekenen:

$$H = \frac{0,9 \cdot [(1 - \alpha) \cdot S + Y]}{S + Y} \cdot Q_{net} - 20 \cdot (1 - 0,75 \cdot N^{3,4}) \quad (7)$$

met:

$$Y = 0,646 + 6 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 273,15) \quad (8)$$

$$Lg = 0,786 + \frac{7,5 \cdot (T - 273,15)}{(T - 35,8)}$$

$$S = \frac{4000 \cdot 10^{Lg}}{(T - 35,8)^2}$$

De waarde van de wrijvingswindsnelheid  $u^*$  wordt bepaald met:

$$u^* = \frac{\kappa u_r}{\ln[z_r/z_0] - \psi(z_r/L) + \psi(z_0/L)} \quad (9)$$

waarbij de laatste term in de noemer doorgaans verwaarloosd kan worden.

De stabiliteitsfuncties zijn voor stabiel en instabiel apart gedefinieerd:

Voor instabiele situaties:

$$\psi(z/L) = 2 \ln\left(\frac{1 + \chi}{2}\right) + \ln\left(\frac{1 + \chi^2}{2}\right) - 2 \arctan(\chi) + \frac{\pi}{2} \quad (10)$$

waarbij:

$$\chi = 4 \sqrt[4]{1 - \frac{16z}{L}} \quad (11)$$

Voor stabiele situaties:

$$\psi(z/L) = -17 \left(1 - \exp\left[\frac{-0,29z}{L}\right]\right) \quad (12)$$

en voor neutrale toestanden geldt:

$$\psi(z/L) = 0 \quad (13)$$

L en  $u^*$  zijn van elkaar afhankelijk, hetgeen betekent dat beide iteratief opgelost moeten worden. We beginnen met een startwaarde voor  $u^*$ :

$$u^*_1 = \frac{2}{3} \cdot \kappa \cdot \frac{u_{10}}{\ln(z_{10}/z_0)} \quad (14)$$

Elke nieuwe waarde voor u wordt bepaald met:

$$u^*_n = \frac{\kappa \cdot u_{10}}{\ln(z_{10}/z_0) - \psi(z/L)}$$

$$\text{Als iteratievoorwaarde geldt} \quad (15)$$

$$|u_n^* - u_{n-1}^*| < 0,05 \cdot u$$

Als aan de voorwaarde  $u_{10}^3 < u_{\text{grens}}$  wordt voldaan dan wordt  $u^*$  gelijk aan  $u^*_1$  en L wordt dan met deze  $u^*$  berekend. De L en de  $u^*$  zijn nu bekend en vervolgens kan de  $\Psi_2$  berekend worden.  $u_{\text{grens}}$  is:

$$u_{\text{grens}} = \frac{-0,39 \cdot H \cdot z_{10} \cdot (\ln z_{10}/z_0)^2}{1000 \cdot \kappa^3} \quad (16)$$

's Nachts (in het algemeen indien de warmteflux negatief is) wordt L berekend uit:

$$L = \frac{T \cdot u^{*2}}{\kappa \cdot g \cdot \theta^*} \quad (17)$$

Indien  $u^*$  bekend is kan L dus voor de nachtelijke situatie berekend worden. De methode voor het berekenen van  $u^*$  en  $\theta^*$  is als volgt:

$$\theta = 0,09 \cdot (1 - 0,5 \cdot N^2) \quad (18)$$

Voor situaties waarbij de zoninstraling positief is, maar de netto straling nog negatief is, geldt een aangepast schema.

Dit aanpassen geschiedt met de volgende formules:

$$\begin{aligned}
 K_Q &= \frac{Q_{zon}}{(1 - 0,75 \cdot N^{3,4})} \\
 \Phi &= \arcsin\left(\frac{K_Q + 69}{1041}\right) \\
 Q_0 &= \frac{1,11 \cdot 20 \cdot (1 - 0,75 \cdot N^{3,4}) \cdot (S + Y)}{(1 - \alpha) \cdot S + Y} \\
 Lm &= 60 \cdot N + 5,31 \cdot 10^{-13} \cdot T^6 - 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot T^4 - 0,12 \cdot Q_0
 \end{aligned} \tag{19}$$

$$\begin{aligned}
 K_0 &= \frac{Q_0 - Lm}{(1 - albedo) \cdot (1 - 0,75 \cdot N^{3,4})} \\
 \Phi_0 &= \arcsin\left(\frac{K_0 + 69}{1041}\right) \\
 \theta^* &= \theta\left(1 - \left(\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2\right)
 \end{aligned}$$

$$\Delta u^* = u^*_{neutraal} - \frac{4 \cdot 5,2 \cdot \kappa \cdot g \cdot z_{10} \cdot \theta^*}{T \cdot \ln(z_{10}/z_0)} \tag{20}$$

Hierin is  $u^*_{neutraal}$ :

$$u^*_{neutraal} = \frac{u_{10} \cdot \kappa}{\ln(z_{10}/z_0)}$$

Is  $\Delta u^*$  kleiner dan nul dan wordt  $u^*$  gedeeld door 2. In alle andere gevallen wordt  $u^*$ :

$$u^* = \frac{u^*_{neutraal} + \sqrt{\Delta u^*}}{2} \tag{21}$$

Wordt  $u^*$  kleiner dan 0,06 dan wordt  $u^*$  op de minimale waarde van 0,06 gezet.

Uiteindelijk wordt de stabiliteit gekoppeld aan de waarde van L: neutrale omstandigheden worden daarbij gedefinieerd als  $|L| > 1000$ ;  $-1000 < L < 0$  geeft instabiele situaties aan en indien  $0 < L < 1000$  dan is de atmosfeer stabiel.

De waarde van L voor positieve waarden moet worden begrensd. De kleinst mogelijke positieve waarde wordt gesteld op  $100 \cdot z_0$ . Indien  $L < 100 \cdot z_0$ , dan wordt de waarde van L gelijk gesteld aan  $100 \cdot z_0$ .

## 3.2 Bodemvochtigheid

In de berekeningsmethode voor de heatflux is een bodemvochtigheidsparameter  $\alpha$  (de Priestley-Taylor parameter) nodig. Deze wordt voor onze omgeving doorgaans op 0.9 (in STACKS-v2.3) of 1.0 (in de KNMI routines van Beljaars en Holtslag (1990)) gesteld. Echter bleek uit een gevoeligheidsanalyse van STACKS-v2.3 dat de uitkomsten (in termen van concentraties) redelijk gevoelig zijn voor de exacte waarde van  $\alpha$  bij dispersieberekeningen voor matig hoge bronnen ( $h_s=60$  m); voor lage bronnen minder. Deze parameter werkt door op verschillende atmosferische parameters, waardoor een versterkt effect ontstaat.

Het is aannemelijk dat  $\alpha$  in de zomer tijdens mooi weer lagere waarden zal aannemen. Mooi weer perioden leiden tot uitdrogen van de grond, waardoor de  $\alpha$ -waarde daalt. De hogere waarden van  $\sigma_v$  en  $\sigma_w$  leiden tot snelle dispersie en in bepaalde gevallen tot de hogere concentraties. Voor de hoge percentielen kan een goede beschrijving van deze hogere  $\sigma_v$  en  $\sigma_w$  waarden dus van belang zijn.

Er is nog een aanwijzing dat de  $\alpha$ -waarde niet constant is.

Het berekeningsschema van Holtslag en Van Ulden is getoetst aan metingen. Enige hiervan zijn te vinden in KNMI WR-87-2, alwaar op blz. 43 een vergelijking tussen gemeten en berekende waarden van de heat-flux is gegeven. Er is daar een aanwijzing te vinden dat bij hoge heat-fluxen onderschatting plaatsvindt. Door Galinski en Thomson (UK Met-office) zijn 3 methoden onderling en met metingen vergeleken. Daarin blijkt duidelijk dat de Holtslag-van Ulden methode de warmteflux onderschat voor grote waarden van de warmte-flux.

In het OPS model is de bodemvochtigheid wel als een tijdsafhankelijk proces beschreven. Het zou dus aan te bevelen zijn om een variabele  $\alpha$  in te bouwen. Dit heeft echter alleen dichtbij bij een bron effect. Indien neerslag gegevens worden meegeleverd bij de uiteindelijke versie van het model, dan is een tijdsafhankelijke uitdroogfunctie te overwegen. Anders zou overwogen kunnen worden om een seizoen- en dag afhankelijke functie toe te passen. Dit laatste is voor een korte-termijnmodel minder fraai.

Echter blijkt bij een nadere analyse dat in de literatuur geen methode aanwezig is om op een verantwoorde wijze een functie aan te nemen die voor warm zonnig weer  $\alpha$  voorspelt. De onzekerheden in de research methoden zijn zo groot, dat uiteindelijk gekozen is toch een constante waarde van  $\alpha$  aan te bevelen. De waarde die gekozen is:  $\alpha=1$ .

## 3.3 Het windprofiel

### 3.3.1 Windsnelheidsprofiel

De windsnelheid neemt met de hoogte doorgaans toe. De mate van toename hangt weer af van de atmosferische stabiliteit. Ruwweg kan de windsnelheid op hoogte  $z$  berekend worden uit de 10 m-windsnelheid met  $u(z)/u(10)=(z/10)^p$ . De macht  $p$  is ongeveer 0.10 bij instabiel weer; 0.15-0.25 bij neutraal en 0.20-0.50 bij stabiel weer. In stabiele situaties raken luchtlagen 'ontkoppeld': er kunnen flinke verschillen in windsnelheid en windrichting ontstaan. Terwijl het

aan de grond maar nauwelijks waait (bijv. 2 - 3 m/s - een zacht windje), kan het op 100 m hoogte hard waaien (wel 10 of 12 m/s).

Deze formulering is in het oude Nationaal Model gebruikt.

In het referentiemodel wordt het logaritmisch windprofiel toegepast, waarbij de windsnelheidstoename functies zijn van L en u\*.

Alvorens het windprofiel te berekenen, moet de hoogte z waarop de berekening wordt uitgevoerd, getest zijn; indien  $z < z_0 + 0.5$  wordt  $z = z_0 + 0.5$ .

Als L en u\* bekend zijn dan kan ook  $\Psi(z/L)$  worden berekend.

is  $L > 0$  dan:

$$\Psi(z/L) = -17 \cdot \left( 1 - e^{\frac{-0,29 \cdot z_p}{L}} \right)$$

is  $L < 0$  dan:

(22)

$$\Psi(z/L) = 2 \cdot \ln\left(\frac{1+X}{2}\right) + \ln\left(\frac{1+(X)^2}{2}\right) - 2 \cdot \arctan(X) + \frac{\pi}{2}$$

$$\text{met } X = \left(1 - 16 \frac{z_p}{L}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Nu kan de windsnelheid op iedere hoogte ( $z_p$ ) berekend worden met de formule:

$$u_{pluim} = u_{10} \cdot \frac{\ln\left(\frac{z_p}{z_0}\right) - \Psi(z_p/L) + \Psi(z_0/L)}{\ln\left(\frac{z_{10}}{z_0}\right) - \Psi(z_{10}/L) + \Psi(z_0/L)} \quad (23)$$

De begrenzing van deze formuleringen is 200 m; daarboven wordt de waarde op 200 m als constant verondersteld.

### 3.3.2 Windrichtingsprofiel

In 1902 heeft Ekman een theoretische formulering voor de draaiing van het horizontale windveld in de menglaag opgesteld. In deze formulering wordt de balans tussen de optredende Corioliskracht en de druk- en wrijvingskrachten in de menglaag beschreven.

Indien nu in het horizontale vlak een assenstelsel wordt gekozen, waarvan de eerste component parallel aan de geostrophische wind is gericht, en de tweede component loodrecht hierop, dan kan een set gekoppelde tweede orde lineaire differentiaalvergelijkingen worden opgesteld voor

de horizontale orthogonale windcomponenten  $u$  en  $v$ .  $u$  en  $v$  zijn de horizontale componenten van de wind in het geostrophische assenstelsel en  $G$  is de geostrophische windsnelheid:

$$\begin{aligned} -K_{mz} \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} &= f_c v \\ K_{mz} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} &= f_c (u - G) \end{aligned} \quad (24)$$

Daarin is  $K_{mz}$  de verticale turbulente uitwisselingscoefficient voor momentum.

De oplossing van dit stelsel vergelijkingen is

$$\begin{aligned} u &= G[1 - e^{-\gamma z} \cos(\gamma z)] \\ v &= G[e^{-\gamma z} \sin(\gamma z)] \end{aligned} \quad (25)$$

met

$$\gamma = \sqrt{\frac{f_c}{2K_{mz}}} \quad (26)$$

Deze oplossing staat bekend als de Ekman spiraal. Uitgaande van deze oplossing kan eenvoudig worden afgeleid, dat de hoek  $\alpha$  tussen de wind op een willekeurige hoogte in de menglaag en de geostrophische wind kan worden berekend uit

$$\alpha = \arctan \left[ \frac{1 - e^{-\gamma z} \cos(\gamma z)}{e^{-\gamma z} \sin(\gamma z)} \right] \quad (27)$$

De winddraaiing ten opzichte van de oppervlaktewind kan worden bepaald door zowel van de oppervlaktewind als de wind op hoogte de richtingshoeken te bepalen in het geostrophische assenstelsel en vervolgens het verschil uit te rekenen. De winddraaiing is sterk afhankelijk van de stabiliteit. In onstabiele condities is  $\alpha(z=z_{10})$  typisch tussen  $5^\circ$  en  $10^\circ$ , in neutrale condities tussen  $15^\circ$  en  $20^\circ$ , en in stabiele condities tussen  $30^\circ$  en  $50^\circ$  (Hanna et al, 1982).

Deze parametrisatie, die bekende fysische parameters bevat, wordt echter te weinig door meetgegevens bevestigd. De reden hiervoor moet gezocht worden in het feit dat naast lokale parameters ook mesoschaal effecten een belangrijke invloed op het windrichtingsprofiel hebben. Deze mesoschaal effecten zijn echter zeer moeilijk te incorporeren.

Daarom wordt in de uiteindelijke aanbeveling gekozen voor een parametrisatie, die de winddraaiing met de hoogte, gemeten te Cabauw beschrijft als een empirische functie van de Obukhov lengteschaal  $L$  en de dikte van de grenslaag  $h$ , zoals gegeven door Van Ulden en Holtslag (1985):

$$\alpha(z) = \alpha(h) d_1 (1 - e^{-z(d_2/h)}) \quad (28)$$

waarbij  $\alpha(h)$  de maximale winddraaiing is bij de top van de grenslaag en die afhankelijk van de stabiliteit is:

$\alpha(h) = 0$  graden voor  $h/L < -10$  (d.w.z. geen winddraaiing voor zeer onstabiel)

$\alpha(h) = 20 + 25 (1 + 0.18 h/L)$  graden voor  $-10 < h/L < 0$

$\alpha(h) = 45$  graden voor  $h/L > 0$

met  $d_1 = 1,23$  en  $d_2 = 1,75$

### 3.4 De atmosferische grenslaag: beschrijving van de turbulentie-parameters

Hier wordt aangegeven wat de procedure is voor het berekenen van de noodzakelijke turbulentieparameters  $\sigma_v$ ,  $\sigma_w$  en de tijdschaal  $T_1$ . In het referentiemodel bepalen deze de waarden van  $\sigma_y$  en  $\sigma_z$ , maar hebben ook invloed op de berekening van de grenslaaghoogte  $z_i$ .

#### 3.4.1 De turbulentieparameters $\sigma_v$ en $\sigma_w$

De parameters  $\sigma_v$  en  $\sigma_w$  zijn hoogte-afhankelijk. In het referentiemodel worden deze als volgt berekend (afgeleid van Gryning et al (1987). Voor instabiele situaties ( $-1000 < L < 0$ ):

$$\left(\frac{\sigma_{v_f}(z)}{u^*}\right)^2 = 0,35 \left(-\frac{z_i}{\kappa L}\right)^{2/3} + \left(1,7 - \frac{z}{z_i}\right) \quad (29)$$

$$\left(\frac{\sigma_w(z)}{u^*}\right)^2 = 1,5 \left(-\frac{z}{\kappa L}\right)^{2/3} e^{-2\frac{z}{z_i}} + \left(1,7 - \frac{z}{z_i}\right) \quad (30)$$

De term  $(1,7 - z/z_i)$  is gekozen ten einde afstemming met formule (32) voor stabiele condities te krijgen (oorspronkelijk was de term  $2 - z/z_i$ ). Het  $\sigma_w$  profiel wordt echter op een vergelijkbare manier beschreven door Holtslag en Moeng (1991), zoals bij de beschrijving van de oppervlaktelaag wordt toegelicht is deze formulering voor geringe hoogten meer geschikt:

$$\sigma_w^3 = \left[1,6u^{*2} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)\right]^{3/2} + 1,2w^{*3} \left(\frac{z}{z_i}\right) \left(1 - 0,9\frac{z}{z_i}\right)^{3/2} \quad (31)$$

Deze laatste uitdrukking wordt nu gebruikt in het referentiemodel: het voordeel hiervan is dat dit niet tot discontinuïteiten leidt bij de overgang van oppervlaktelaag naar de rest van de menglaag. Voor neutraal ( $|L| > 1000$ ) wordt gebruikt:

$$\sigma_{v_f}(z) = \sigma_w(z) = 1,3u^* e^{\left(-2\frac{fz}{u^*}\right)} \quad (32)$$



en voor stabiel ( $0 < L < 1000$ ):

$$\sigma_{vj}(z) = \sigma_w(z) = 1.3u^* \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{(3/2)} \quad (33)$$

De constanten in deze formules verdienen de nodige aandacht; hieromtrent is nog wel wat variatie in de literatuur te vinden, daarom volgt hier enige toelichting. Deze uitdrukkingen zijn verkregen door windfluctuatie metingen (resultierend in waarden voor  $\sigma_v$  en  $\sigma_w$ ) over ongeveer 3 jaar (in Wageningen, Haarweg en te Kollum in Friesland) te beschouwen met een berekende ruwheidslengte. Deze ruwheidslengte op de locaties Wageningen en Kollum zijn bepaald door Hanna's (1981) uitdrukking toe te passen: daarmee wordt  $z_0$  uit  $\sigma_\theta$  metingen afgeleid:

$$z_0 = z e^{-\frac{\kappa c_v}{\sigma_\theta}} \quad (34)$$

Aanbevolen waarden voor  $c_v$  variëren van 1.64 tot 2.0, maar de vraag is daarbij welk deel van het turbulente spectrum werd meegenomen bij de bepaling van  $\sigma_\theta$ . Om deze formule te calibreren zijn gemeten waarden gebruikt van  $\sigma_\theta$  door middel van de zg. COPS methode (Erbrink, 1989), die feitelijk gefilterde waarden oplevert van  $\sigma_\theta$ . Daarbij werd een ruwheid van  $z_0=5$  cm voor de Abbenes locatie (alwaar goede windfluctuatiemetingen met COPS beschikbaar zijn) uit sonic metingen. Hieruit kon voor  $c_v$  tijdens neutrale condities (neutraal is daarbij gedefinieerd als  $|L| > 1000$ ) het volgende bepaald worden:  $c_v=1.40$ . Deze constante waarde is gebruikt voor de andere locaties om de windrichtingsafhankelijke ruwheid  $z_0$  te bepalen.

Deze berekende ruwheid blijkt sterk windrichtingsafhankelijk te zijn, variërend van 5 cm (aanstroming over kilometers weiland) tot 40 cm (aanstroming over de stad Wageningen). Gemiddeld echter is de ruwheid duidelijk lager dan de aanvankelijk gekozen 20 cm.

Deze windrichtingsafhankelijke ruwheid is daarom toegepast om de parameter keuze in bovenstaande formules beter te schatten. Daarnaast is het wenselijk om de berekeningsuitkomsten voor de overgangen instabiel->neutraal->stabiel op elkaar te laten aansluiten, in plaats van discontinuïteiten toe te staan, mits het experimenteel materiaal dit toestaat. De constante voor neutrale en stabiele condities is daarom op de waarde van 1,3 gezet. Toepassing van de constante 1.30 op de dataset van Wageningen (periode 1991-1994) geeft bevredigende (tot zelfs prima) correlaties.

We voorzien hiermee de aansluiting met Nieuwstadts (1984) aanbeveling (genoemd door Gryning), en vermijden tevens de discontinuïteiten. In de dispersieberekeningen voor  $\sigma_y$  wordt daarbij steeds een bijdrage van langzame fluctuaties bijgeteld. Bij afwezigheid van metingen kan de gemiddelde waarde van 0.3 m/s worden genomen. Voor het berekenen van frekwentieverdelingen is een constante waarde voor de langzame fluctuaties niet voldoende; dan wordt een verdeling aangenomen op basis van metingen. De verdeling is uniform, lopend van 0,05 tot 0,55 met een gemiddelde van 0,3 m/s. Dit spoort met de opmerking van Gryning et al (op blz 83 van zijn publikatie), dat de formule voor stabiel geldt voor middelingstijden van ruwweg 30 minuten en dat door langzame fluctuaties (hij noemt gravity waves) nog een extra bijdrage nodig kan zijn.

De waarde van  $\sigma_{v1}$  kan op verschillende manieren worden bepaald: per bron, per receptorpunt of 1 waarde per uur. Er is voor gekozen om per uur 1 waarde te bepalen, die op zich door toepassing van een random generator moet worden verkregen. In praktijk leidt dit echter tot de ongewenste situatie dat verschillende computerprogramma's voor dezelfde berekening verschillende waarden van  $\sigma_y$  zullen berekenen waardoor niet consistente resultaten worden verkregen. Het is zelfs zo dat bij gebruik van hetzelfde rekenprogramma (bijvoorbeeld KEMA STACKS) verschillende resultaten verkregen kunnen worden wanneer de berekening enkele keren worden herhaald. Omdat dit een ongewenste situatie is, is er uiteindelijk voor gekozen om de randomwaarde van  $\sigma_{v1}$  in de meteorologische invoer op te nemen. Dat maakt dat alle computerprogramma's steeds dezelfde waarde van  $\sigma_{v1}$  gebruiken (onafhankelijk van de computer die gebruikt wordt) en er dus consistentie in de berekeningsresultaten ontstaat.

### 3.4.2 Tijdschaal $T_1$

Voor de bepaling van de tijdschaal  $T_1$  (met  $T_1 = \beta T_e$ ) wordt de experimentele uitdrukking gebruikt:

$$T_{e_{yz}} = 26 \frac{\sigma_{vf}}{u} \left[ \ln \left( \frac{z}{z_0} \right) \right]^2 \quad (35)$$

waarin  $\beta$  als turbulentie-afhankelijke parameter is aangenomen (zie Erbrink, 1995; blz 149:  $\beta = 0.4 u / \sigma_v$ , in bovenstaande formule is deze reeds opgenomen). Zowel  $u$  als  $\sigma_{vf}$  dienen hier op de referentiehoogte  $z$  (doorgaans 10 m) berekend te worden. Deze uitdrukking wordt ook gebruikt voor berekeningen boven de grenslaag ( $z > z_i$ ).

### 3.4.3 Turbulentieparameters in de oppervlaktelaag

In de oorspronkelijke formulering van het model STACKS-v2.3 is geen onderscheid gemaakt tussen de turbulentieparameters dicht bij de grond en de waarden hoger in de atmosfeer. Een differentiatie blijkt toch noodzakelijk te zijn. Toetsing van de resultaten van STACKS-v2.3 berekeningen met de metingen uit de Prairiegrass data lieten onacceptabele verschillen zien. In de literatuur zijn voor de oppervlaktelaag meerdere alternatieve schema's beschikbaar. Een aantal ervan is gebaseerd op werk van H. Panofsky. Andere schema's zijn beschreven in *Atm. Turbulence and Air Pollution Modeling* (Eds.: Nieuwstadt en van Dop, 1982). De experimentele onderbouwing is niet altijd even sterk. Maar, dit is eveneens het geval voor de beschrijving van een K-profiel in de oppervlaktelaag, hetgeen als een alternatief kan gelden.

Op grond van de Prairiegrass data als toetsmateriaal is een parameterisatie gekozen voor de oppervlaktelaag (tot  $z = 50$  m). Onder instabiele omstandigheden worden de modelconcentraties vrijwel alleen bepaald door veranderingen in  $\sigma_w$ . Onder stabiele omstandigheden hangen de concentraties enigszins af van  $\sigma_w$  (waarvoor geen alternatieve parametrisatie bestaat) maar sterker van  $T_L$ . Bovendien is het redelijk te verwachten dat turbulentie tijdschalen kleiner wor-

den wanneer de wervels de grond naderen: in dit traject zullen ze opbreken tot kleinere wervels.

Hiermee rekening houdend is gezocht naar een betere beschrijving van het  $\sigma_w$  profiel voor instabiele situaties en een betere beschrijving van  $T_L$  voor stabiele condities.

Voor instabiele situaties ( $L < 0$ ) blijkt de grenslaagformulering (zoals gegeven door bv. Gryning, 1987) in formules (29) en (30) de waarnemingen dicht bij de grond niet meer goed te beschrijven.

$\sigma_w$  blijkt daar beschreven te kunnen worden door:

$$\sigma_w = 1.34w_* \left( \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \quad (36)$$

Dit is overeenkomstig de formulering van Willis en Deardorff, die meetgegevens uit de Kansas data goed verklaart tot een hoogte van  $0,10 z_i$  (te vinden in Nieuwstadt en van Dop (1982) blz. 133). Deze formule vormt de convectieve limiet van formule (31).

Voor stabiele condities ( $L > 0$ ) is niet direct kritiek op de turbulentieprofielen voor de hand liggend. De grenslaag is dan doorgaans beperkt en 10% van de grenslaag stelt dan helemaal niet meer zoveel voor. Dicht bij de grond mag aangenomen worden dat de waarden  $T_L$  kleiner zijn dan hogerop in de grenslaag.

Toepassing van de in Nieuwstadt en van Dop vermelde aanbeveling geeft betere overeenstemming met de Prairiegrass-metingen:

$$T_{l,y,z} = a \frac{z_i}{\sigma_{v,w}} \left( \frac{z}{z_i} \right)^b \quad (37)$$

waarbij  $a=(0.07$  of  $0.10)$  en  $b=(0.5$  of  $0.8)$  voor de (v,w of y,z) richting.

De tijdschaalwaarden zijn dicht bij de grond kleiner volgens deze formulering zodat de dispersie minder is.

Een betere mogelijkheid is om de tijdschaal te kiezen volgens Flesch et al. (1995):

$$T_l = \frac{z}{2\sigma_w} \left( \frac{1}{1 + 5\frac{z}{L}} \right), \text{for } L > 0$$

$$T_l = \frac{z}{2\sigma_w} \left( 1 - 6\frac{z}{L} \right)^{0.25}, \text{for } L < 0 \quad (38)$$

Hier dient de waarde van  $\sigma_w$  op de hoogte van het pluimzwaartepunt  $z$  te worden gebruikt. Deze formulering heeft enkele voordelen:

1 deze is al afgestemd op de Prairie grass data.

- 2 de waarde van  $z_i$  komt niet in de formuleringen voor. Wanneer dat mogelijk is, is het beter om deze parameter niet in de uitdrukkingen te laten verschijnen; de onzekerheid in  $z/z_i$  is vaak groot; bovendien: dicht bij de grond zal  $z_i$  niet de bepalende factor zijn.
- 3 Deze formules geven voor de top van de surface layer dezelfde  $T_1$  waarden als de formulering in STACKS-v2.3.

**Samengevat:**

- Beschrijf het  $\sigma_w$  profiel voor instabiele en neutrale situaties voor elke  $z$  door middel van:

$$\sigma_w^3 = \left[ 1.6u_*^2 \left( 1 - \frac{z}{z_i} \right) \right]^{3/2} + 1.2w_*^3 \left( \frac{z}{z_i} \right) \left( 1 - 0.9 \frac{z}{z_i} \right)^{3/2} \quad (39)$$

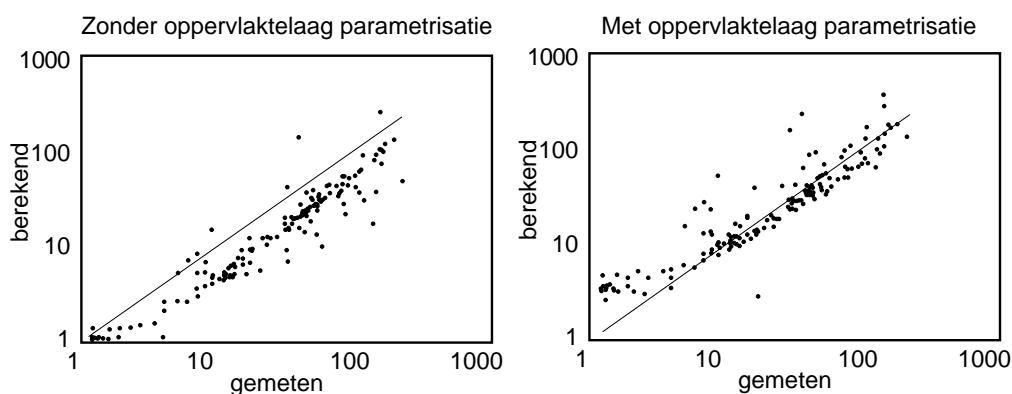
- Beschrijf de  $T_1$  waarde voor  $z < 50$  m (de oppervlaktelaag) met:

$$T_{l,y,z} = \frac{z}{2\sigma_w} \left( \frac{1}{1 + 5 \frac{z}{L}} \right), \quad \text{indien } L > 0 \quad (40)$$

$$T_{l,y,z} = \frac{z}{2\sigma_w} \left( 1 - 6 \frac{z}{L} \right)^{0.25}, \quad \text{indien } L < 0$$

hetgeen voor zowel de horizontale als de verticale turbulentie wordt toegepast. Hierbij wordt aangenomen dat de wervelgrootte in  $y$ - en  $z$ -richting gelijk is. Voor de langzame fluctuaties die alleen in het horizontale vlak optreden, wordt een tweede - grote - tijdschaal verrekend, die hiervan onafhankelijk is.

- De vergelijking met Prairiegrass data is in Figuur 7 gegeven: de overeenstemming is goed.
- De aansluiting met overige  $\sigma_w$  en  $T_1$  parametrisaties is goed.
- De dispersieformulering bevat geen discontinuïteiten; interpolaties zijn daarom niet nodig.

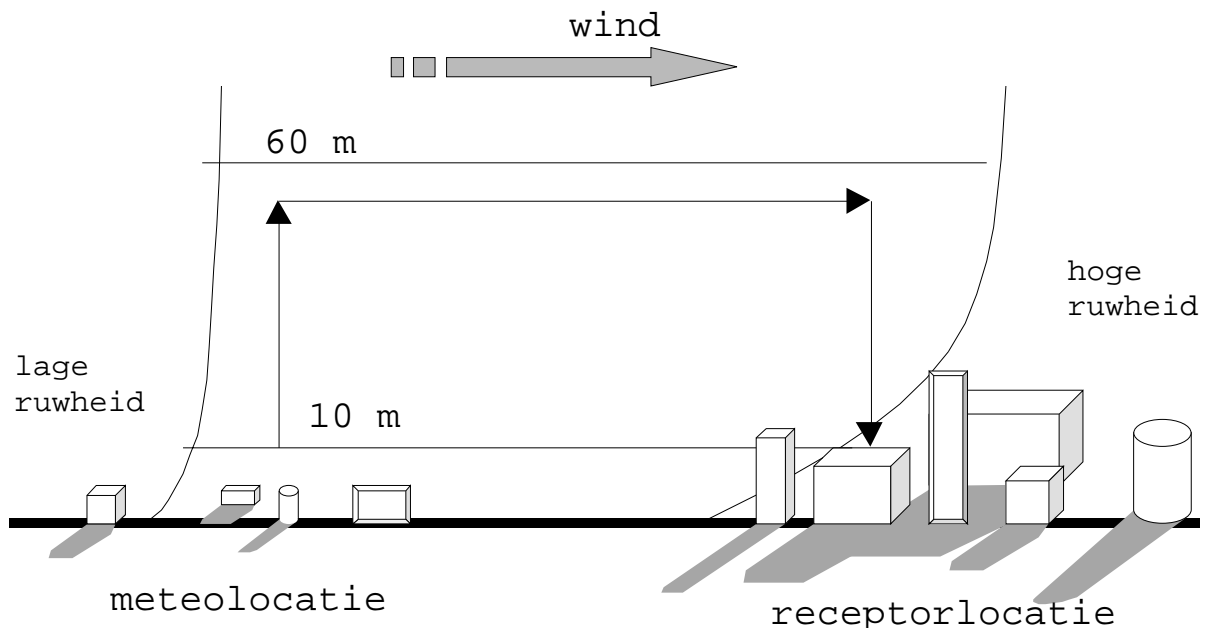


Figuur 7 Vergelijking modeluitkomsten en metingen voor de Prairiegrass data.

- De turbulentieparameters zijn bronspecifiek, per bron moet dus een waarde voor alle drie de turbulentieparameters worden bepaald.

### 3.4.4 Windrichtingafhankelijke ruwheid bij meteostation

Het verspreidingsmodel gebruikt meteorologische waarnemingen om voor elk uur de verspreiding in de lucht te kunnen berekenen. Een belangrijke ingangparameter is de meetwaarde van de windsnelheid. De windsnelheid echter die men meet wordt sterk beïnvloed door terreinobstakels die in de omgeving aanwezig zijn. Deze terreinruwheidslengte is een maat voor de hoeveelheid obstakels. Hoe meer obstakels, hoe groter de ruwheidslengte en hoe meer de wind wordt afgeremd. Dit betekent dat de gemeten windsnelheid lager zal zijn naarmate er bovenwinds een grotere ruwheidslengte bestaat. Op de meetlocatie voor de meteorologische metingen (Schiphol of Eindhoven) zal de bovenwindse terreinruwheid niet constant zijn. Dit vertaalt zich in verschillende windsnelheden in de metingen op 10 m hoogte (de standaardmeethoogte) bij dezelfde hoogtewind.



*Figuur 7a* Verschillen in ruwheden tussen meteolokatie en receptorlocatie moeten gecorrigeerd worden door windprofielen te berekenen met gelijke windsnelheden op 60 m en ruwheidsafhankelijke windsnelheden op 10 m.

In het verspreidingsmodel willen we graag dat een gemeten windsnelheid maatgevend is voor andere locaties, waarvoor de verspreiding berekend gaat worden. Voor lokale effecten op de meetlocatie voor de meteo (Schiphol of Eindhoven) moet daarom gecorrigeerd worden. Deze correctie kan worden uitgevoerd door de gemiddelde ruwheid op de receptorlocatie te vergelijken met de gemiddelde terreinruwheid op de meetlocatie voor meteometingen. Beter is het om niet de gemiddelde ruwheid op de meteolocatie te nemen, maar de windrichtingafhankelijke ruwheid. Deze zijn namelijk door het KNMI nauwkeurig vastgelegd. Op de receptorlocatie

zou in principe ook een windrichtingafhankelijke ruwheid moeten worden toegepast maar dit stuit op vele praktische bezwaren. Daarom wordt aanbevolen om voor de receptorlocatie een constante ruwheid te gebruiken zoals door Wieringa voorgesteld, maar voor de meteolocatie een windrichtingafhankelijke ruwheid volgens onderstaande tabel. Daarin is de ruwheid (in cm) weergegeven voor windrichtingssectoren van 20 graden.

ruwheidslengten (cm) voor Schiphol en Eindhoven – per windrichtingssector					
Sector	Schiphol	Eindhoven	sector	Schiphol	Eindhoven
10-20	7,5	5,7	190-200	3,2	22,1
30-40	8,5	13,2	210-220	4,9	11,4
50-60	8,5	16,9	230-240	6,4	8,5
70-80	7,5	39,7	250-260	6,0	18,9
90-100	7,5	48,0	270-280	7,5	32,0
110-120	6,0	28,4	290-300	13,0	34,1
130-140	3,2	25,0	310-320	16,9	28,4
150-160	5,7	8,5	330-340	14,2	19,8
170-180	3,2	16,9	350-360	14,2	16,9

Bij een bepaalde windrichting wordt uit de gemeten windsnelheid op de meteolocatie (de 10 m windsnelheid) via onderstaande formule de windsnelheid op 60 m hoogte berekend. Op de plaats van de receptorlocatie heerst dus deze zelfde windsnelheid. Deze windsnelheid op 60 m hoogte wordt met de ter plaatse van de receptorlocatie geldende ruwheid teruggerekend naar de windsnelheid op 10 m hoogte (of welke hoogte men op de receptorlocatie ook maar nodig heeft).

Nu kan de windsnelheid  $u_z$  op iedere hoogte (z) berekend worden met de formule:

$$u_z = u_{ref} \frac{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \psi\left(\frac{z}{L}\right) + \psi\left(\frac{z_0}{L}\right)}{\ln\left(\frac{z_{ref}}{z_0}\right) - \psi\left(\frac{z_{ref}}{L}\right) + \psi\left(\frac{z_0}{L}\right)} \tag{41}$$

waarin de stabiliteitsfunctie  $\psi(z/L)$  en de Obukhov lengte L een rol spelen. Voor  $z_{ref}$  wordt eerst 60 m ingevuld om op de meteolocatie van 10 m hoogte naar 60 m hoogte te gaan; en dan in de tweede stap wordt 10 m ingevuld om op de receptorlocatie van 60 m naar 10 te gaan (zie Figuur 7a). Voor z wordt de ruwheidslengte ingevuld die behoort bij de windrichtingssector, zoals te vinden in de voorgaande tabel; let op, deze moet in de formule worden ingevuld in meters!

### 3.5 De grenslaaghoogte

In neutrale en stabiele situaties kan met enig recht de dikte van grenslaag berekend worden onder aanname van een stationaire situatie. Overdag bij instabiele situaties kan dit niet: de grenslaagdikte zal toenemen onder invloed van de zonninstraling. Dit tijdsafhankelijke proces is belangrijk en hiermee moet het model rekening houden. Voor onstabiele situaties wordt de groei van de grenslaag berekend met het groeiemodel van Driedonks (1982):

$$\frac{dz_i}{dt} = C \frac{\sigma_w^3}{z_i \Delta b}, \quad \text{waarin } \Delta b = \frac{g}{T} (\Delta\theta + 0.61 \Delta q) \quad (42)$$

Voor de constante C wordt de waarde van 0,5 gekozen; deze beschrijft het beste de grenslaaghoogten uit een 3-jarig metingen bestand, dat door KEMA is opgezet. In het referentiemodel wordt als praktische benadering voor  $\sigma_w$  de waarde van  $\sigma_{vs}$  op 10 m hoogte genomen. Als tijdstap wordt arbitrair 3 minuten gekozen.  $\Delta\theta$  is de temperatuur sprong aan de top van de grenslaaghoogte en  $\Delta q$  is de H<sub>2</sub>O-damp verhouding. Deze laatste invloed van de luchtvochtigheid wordt verwaarloosd in het model, omdat de invloed ervan gering is.

Voor neutrale situaties overdag wordt de formule van Zilitinkevich gebruikt:

$$z_i = B \frac{u^*}{f} \quad (43)$$

B is een evenredigheidsconstante. Voor neutrale condities ( $|L| > 1000$ ) is de gemiddelde hoogte van de  $z_i$  ongeveer 350 m in midden Nederland (afgeleid van het 3-jarig bestand, dat KEMA in Wageningen heeft opgebouwd). Bij een gemiddelde windsnelheid van 5 m/s en een ruwheid van ongeveer 20 cm leidt dit tot  $B=0.07$ . Deze waarde is laag ten opzichte van B-waarden in andere modellen. Theoretische afleidingen geven waarden van 0,25-0,40. In de literatuur blijken B-waarden, die duidelijk zijn afgeleid van experimenten echter rond 0,07 te liggen, zoals bijvoorbeeld is afgeleid uit de Kincaid dataset. Een waarde van  $B=0,07$  geeft een zeer goede overeenstemming voor  $z_i$ -waarden, die uit ballonsonderingen zijn afgeleid. Daarbij is als criterium voor het vinden van de top van de grenslaaghoogte gebruikt:  $d\theta/dz > 0.005$  K/m.

's Nachts wordt de volgende uitdrukking gebruikt:

$$z_i = \frac{0.07 u^* / f}{1 + 0.33 z_i / L} \quad (44)$$

hetgeen een aangepaste vorm is van Van Dops uitdrukking (Dop et al., 1982). Deze modificatie is gedaan om aan te sluiten op de formule voor neutrale omstandigheden.

Indien geen informatie over de stralingsbalans aanwezig is (wanneer alleen de bewolkinggraad als gegeven beschikbaar is, zoals in de Nederlandse praktijk) wordt L afgeleid uit  $u^*$ :  $L = 1100 u^{*2}$ . In STACKS-v2.3 is een minimum hoogte voor de grenslaag gekozen van 100 m. Dit is nodig om rekentechnische problemen te voorkomen. Immers wordt zi als schalingsparameter gebruikt in bijvoorbeeld de turbulentieprofielen. Om aansluiting bij andere modellen (zoals OPS van RIVM) te verkrijgen is deze waarde verlaagd tot 50 m. Het verlagen van de minimum grenslaaghoogte tot 50 m kan de jaargemiddelde concentraties maximaal een factor

twee beïnvloeden, echter nabij de hoogste jaargemiddelde waarden is dit effect 10%. Er is geen discontinuïteit voor een bron rond de 50 m. Verder verlagen van de minimum-grenslaaghoogte heeft tot gevolg dat de concentratieniveaus nog behoorlijk kunnen veranderen. Een keus voor de minimum hoogte van de grenslaag van 50 m lijkt daarom nog steeds een goed compromis. Als maximale grenslaaghoogte is arbitrair voor 2000 m hoogte gekozen.

### 3.6 Het temperatuur profiel

Om de pluimstijging en de groei van de grenslaagdikte te kunnen berekenen is een temperatuurgradiënt ( $\Delta\theta$ ) nabij de top (eigenlijk boven de top) van de grenslaag noodzakelijk. Bij de pluimstijgingsberekening is de waarde vooral belangrijk om de penetratiegraad in de inversie-laag te bepalen. Deze  $\Delta\theta$  is niet te berekenen uit lokale parameters; immers deze temperatuurgradiënt wordt bepaald voor meer mesoschaal en grootschaliger weersverschijnselen. In deze gevallen zijn eigenlijk metingen vereist. Echter, in de normale praktijk zullen deze afwezig zijn. In de meeste moderne modellen wordt een constante waarde (eventueel uitgesplitst naar winter en zomersituaties) verondersteld; bijvoorbeeld  $d\theta/dz=0.010$  K/m.

Uit een analyse van gemeten temperatuurprofielen (3 jaar sonderingen te De Bilt om 06h00 's morgens) blijkt dat gemiddeld genomen de vorm van het temperatuurprofiel niet sterk verschilt in wisselende seizoenen en bij diverse windrichtingen. Echter, wel blijken luchtmassa's, komend vanaf het continent stabielere te zijn dan wanneer de wind van de oceaan waait. Hiervan gebruik makend is het volgende empirisch temperatuurverloop met de hoogte  $z$  gevonden:

hoogte:		10	60	160	260	360	460	560	660	760	860	960	1060	m
$\theta_{z,norm}(x100)$ :	0	3	22	37	48	57	63	71	78	84	92	100		

Boven 1060 m wordt het temperatuurprofiel geëxtrapoleerd.

De functie  $\theta_{z,norm}$  (06h00, op 1060 m hoogte) is afhankelijk van maand  $M$  and windrichting  $D$ :

$$\theta_z(M, D) = \theta_{z, norm} \left[ 7 + 1.8C_s + (4 + 1.5C_s) \cos\left(\frac{D-90}{180}\right)\pi \right] \quad (45)$$

$$\text{met } C_s = \cos\left(\frac{M-1}{6}\pi\right)$$

Deze formule wordt gebruikt om de temperatuurgradiënt te bepalen boven  $z=z_i$ ; daaronder wordt verondersteld dat de atmosfeer een neutraal temperatuurverloop heeft door de daar aanwezige menging:  $d\theta/dz=0.0$  K/m. De groei van de menglaag wordt berekend voor alleen instabiele situaties ( $-1000 < L < 0$ ), waarbij  $\Delta\theta$  (over een hoogte traject van 100 m) op elk uur van de dag wordt bepaald op de hoogte van  $z_i$ .

De pluimstijging wordt dus alleen in stabiele atmosferen berekend indien de pluim stijgt tot boven de waarde van  $z_i$  (deze waarde kan 's nachts gering zijn met een ondergrens van 50 m, zoals in de vorige sectie is aangegeven). De formulering voor het T-profiel bestaat uit 3 termen;



de eerste geeft de gemiddelde waarde aan voor dat hoogte traject; de tweede term weerspiegelt de seizoensfluctuaties en de derde term is een versterkingsfactor die het effect van continentale dan wel maritieme stromingen aangeeft. Deze formulering van het temperatuurprofiel kan gebruikt worden voor locaties met een straal van ongeveer 250 km rond De Bilt.

## 3.7 Pluimstijging en dispersieparameters

### 3.7.1 Dispersie

Het referentiemodel is een gaussisch verspreidingsmodel, waarin  $\sigma_y$  en  $\sigma_z$  continue functies van de turbulentieparameters zijn. De atmosferische turbulentie wordt daarbij weergegeven in twee parameters, de intensiteit ( $\sigma_v$  en  $\sigma_w$ ) en de tijdschaal  $T_1$  (de laatste is een maat voor de gemiddelde wervelgrootte) in twee richtingen (verticaal en horizontaal). De afgeleide methoden zijn afhankelijk van experimentele fit-parameters, die in de Taylor-dispersie niet voorkomen. Dit Taylor-model biedt belangrijke voordelen: de turbulentieparameters, die direct verantwoordelijk zijn voor de verspreiding, worden gebruikt. Bovendien kunnen deze zowel gemeten als via deelmodellen bepaald worden. In praktijk wordt een lange tijdreeks van uurlijkse waarden van deze parameters als invoer aan het model toegeleverd. Het model berekent dus in principe alle uurgemiddelde concentraties. De lange-termijnstatistiek wordt verkregen door deze uurlijkse concentraties te middelen tot een jaargemiddelde of te sorteren tot alle percentielwaarden.

Het referentiemodel berekent de dispersieparameters  $\sigma_y$  en  $\sigma_z$  direkt uit wind- en turbulentie-metingen en de looptijd van de pluim zonder tussenkomst van stabiliteitsklassen:

$$\sigma_{y_s}^2 = 2\sigma_{v_s}^2 T_{L_y}^2 [t/T_{L_y} + \exp(-t/T_{L_y}) - 1] \quad (46)$$

$$\sigma_z^2 = 2\sigma_w^2 T_{L_z}^2 [t/T_{L_z} + \exp(-t/T_{L_z}) - 1] \quad (47)$$

$$\sigma_y^2 = \sigma_{y_s}^2 + (\sigma_{v_l} t)^2 \quad (48)$$

De basis van dit model is gelegen in de veronderstelling dat deze Taylorformulering kan worden toegepast op zowel de horizontale als de verticale dispersie. De formule geldt voor homogene turbulentie. Turbulentie in de atmosfeer is echter niet homogeen. In het algemeen is de horizontale dispersie groter dan de verticale dispersieparameter:  $\sigma_y > \sigma_z$ . Dit probleem is opgelost door de horizontale turbulentie en dus de dispersie parameter  $\sigma_y$  te scheiden in twee termen, waarvan de eerste stabiliteitsafhankelijk is (de snelle fluctuaties:  $\sigma_{y_s}$ ) en de tweede niet. Deze laatste (de langzame term:  $\sigma_{y_l}$ ) wordt veroorzaakt door allerlei mesoschaal effecten en winddraaiingen die door weersystemen (bijvoorbeeld frontpassages) kunnen worden veroorzaakt. Deze  $\sigma_{y_l}$  wordt berekend op 10 m niveau, dus met  $t (=x/u(10))$  en  $\sigma_{v_l}$  op 10 m niveau. Er

wordt hierbij dus aangenomen dat  $\sigma_{y1}$  in principe onafhankelijk van de hoogte is (zie ook paragraaf 3.11.5).

De snelle term wordt veroorzaakt door wrijving van de wind en opwarming door zoninstraling (convectie) en is een maat voor de turbulentie-intensiteit. Door toepassing van een goed gekozen digitaal filter kan het signaal van een windvaan gescheiden worden in de twee termen. De langzame term  $\sigma_{v1}$  betreft langzame windrichtingsveranderingen, die alleen in het horizontale vlak voorkomen. Zodoende wordt  $\sigma_y$  uit twee bijdragen berekend, waarvan de eerste gelijk is aan  $\sigma_z$  en de tweede voortkomt uit  $\sigma_{v1}$ :

$$\sigma_y^2 = \sigma_{y_s}^2 + (\sigma_{v1} t)^2 \quad (49)$$

Voor de snelle fluctuaties geldt bij isotropie dat  $T_{1y}=T_{1z}$ .

Zowel de turbulentie intensiteitsparameters ( $\sigma_v$  en  $\sigma_w$ ) als de tijdschaal  $T_1$  kunnen berekend worden uit andere grenslaagparameters. Daarbij wordt onderscheid gemaakt tussen de oppervlaktelaag en de rest van de grenslaag; dicht bij de grond wordt de verticale turbulentie immers sterk onderdrukt.

### 3.7.2 Dispersie door buoyancy

Een aanvulling op de dispersieparameters  $\sigma_y$  en  $\sigma_z$ : wordt gevormd door het buoyancy: hierbij komt de toename van de pluimafmetingen door de eigen warmte-inhoud tot uitdrukking.

In de berekening van de dispersieparameters wordt een initiële  $\sigma$ -waarde berekend in navolging van Pasquill (1976):

$$\sigma_{0,y,z}^2 = \Delta h^2 / 12.25 \quad (50)$$

Deze formulering wordt ook in andere bekende modellen gebruikt (zoals in OML, HPDM).

### 3.7.3 Horizontale dispersie t.g.v. winddraaiing

De horizontale dispersie hangt in belangrijke mate samen met de turbulentiegraad van de atmosfeer, maar de hoogte- en stabiliteitsafhankelijke winddraaiing leveren hieraan een extra bijdrage. De totale dispersie wordt beschreven met:

$$\sigma_{y, totaal}^2 = \sigma_{y, turbulentie}^2 + \sigma_{y, winddraaiing}^2 \quad (51)$$

In het navolgende richt de aandacht zich op theoretische formuleringen (zie bijvoorbeeld, Hsu, 1988), waarmee de winddraaiingsafhankelijke term kan worden berekend. Door Pasquill wordt een uitdrukking voor  $\sigma_{y, winddraaiing}$  gegeven. Deze luidt:

$$\sigma_{y, winddraaiing}^2 = \alpha^2 S^2 \sigma_z^2 t^2 \quad (52)$$

Hierin is  $\alpha$  een constante,  $t$  de looptijd,  $\sigma_z$  de verticale dispersieparameter, en  $S$  de afgeleide van de horizontale windcomponent  $v$  naar de hoogte. Deze relatie kan zonder meer gebruikt worden, maar voor toepassing in de praktijk kunnen we een meer handzame formule afleiden. Door te stellen, dat

$$S = \frac{dv}{dz} \cong u \frac{d\theta}{dz} \quad (53)$$

met  $\theta$  de windrichting,

$$\Delta\theta = \frac{d\theta}{dz} \sigma_z \quad (54)$$

en de substitutie

$$t = \frac{x}{u} \quad (55)$$

met  $x$  de afstand tot de bron en  $u$  de windsnelheid, toe te passen,

kan formule (52) worden herschreven tot

$$\sigma_{y, winddraaiing}^2 = \alpha^2 x^2 (\Delta\theta)^2 \quad (56)$$

$\Delta\theta$  is de draaiing van de windrichting op pluimhoogte ten opzichte van de oppervlaktewind. In de formulering is  $\alpha$  een empirische parameter, waarvan literatuurwaarden variëren tussen 0.17 en 0.4. In het huidige model is de waarde 0.4 toegepast.

### 3.8 Pluimstijging

Rookpluimen stijgen in de atmosfeer onder invloed van hun warmte-inhoud (de buoyancy) totdat er thermodynamisch en mechanisch evenwicht met de omgeving is ontstaan. Tijdens de stijging zorgen aanvankelijk de buoyancy krachten - en later de omgevingsturbulentie - ervoor dat de pluim verdund wordt met omgevingslucht. Hierdoor nemen zowel stijgsnelheid als rookgastemperatuur af. Dit proces gaat sneller in een stabiele atmosfeer; de pluimstijging is dan doorgaans minder. De temperatuurgradiënt is daarom belangrijk in dit model. In een atmosfeer met veel turbulentie zal de invloed van deze turbulentie sneller groter zijn dan de buoyancy, dan in een niet-turbulente atmosfeer. In het hier gegeven model wordt hiermee rekening gehouden.

Tijdens instabiele situaties wordt de pluim zo sterk verdund dat het stijgvormogen tot nul is gereduceerd vòòrdat de eindstijging zou zijn bereikt. In instabiele situaties is de pluimstijging dus minder dan in neutrale situaties. Deze gereduceerde pluimstijging is afhankelijk van de bronhoogte; de verticale turbulentie neemt immers toe met de hoogte in het traject vanaf de bodem tot  $0.1 z_i$ , vandaar dat de schoorsteenhoogte in de formulering voorkomt.

Om de mate van deze instabiliteit aan te geven wordt de parameter  $H^*$  gebruikt in navolging van Briggs (1984).  $H^*$  schaalt met de dissipatiesnelheid  $\varepsilon$  (voor turbulentie) en is daarom een goede maat om te bepalen welke pluimstijgformule moet worden toegepast. In convectieve situaties kan  $H^*$  direkt uit het turbulente deel van  $\sigma_v$  geschat worden:

$$H^* = \frac{(w^*)^3}{z_i} = \frac{(\sigma_w/0.6)^3}{z_i} = \frac{4.6\sigma_{vs}^3}{z_i} \quad (57)$$

Hierbij is aangenomen dat  $\sigma_w = 0.6 w^*$  (Weil, 1988).  $H^*$  kan dus uit berekende waarden van  $z_i$  en  $\sigma_w$  afgeleid worden. Volgens Briggs (1984, p. 353) kunnen we de waarde van:

$$C = \frac{\kappa h_s H^*}{4u^{*3}} = \frac{100h_s H^*}{u^3} \quad (58)$$

evalueren; met  $\kappa=0.4$ .

Wanneer deze waarde groter is dan 1 wordt de pluimstijgformule voor instabiele situaties gebruikt:

$$\Delta h = 15 \left( \frac{F_r}{u} \right)^{0.6} \quad (59)$$

$F_r$  is hierbij de resterende warmte-inhoud van de pluim; de coëfficiënt 15 is zo gekozen, dat bij een windsnelheid van 10 m/s dezelfde uitkomsten verkregen worden als bij toepassing van de pluimstijgformule voor neutrale situaties. Op deze wijze sluiten de uitkomsten ervan naar de neutrale kant toe automatisch op de gangbare praktijk aan. Uit diverse studies is gebleken dat de formulering voor neutrale situaties prima voldoet.

Is de waarde van C kleiner dan 1, dan wordt de formulering voor neutrale situaties toegepast ( $F_r=8.8Q_h$ ):

$$\Delta h = \frac{39F_r^{0.6}}{u(z)} \quad (60)$$

Voor stabiele toestanden wordt gebruikt:

$$\Delta h = \left( \frac{1.8F_r T_a}{uz \frac{\partial \theta}{\partial z}} \right)^{1/3} \quad (61)$$

Om te bepalen of het stabiel is, wordt gelet op de potentiële temperatuur gradiënt. Indien deze groter is dan 0.005 K/m is, wordt stijging in een stabiele atmosfeer berekend.

Om de pluimstijging door een gelaagde atmosfeer te berekenen worden de volgende formules gebruikt:

startend met  $F_r=F_b$ ,  $z_b=0$  en  $z_t=z_b+10$  (bij een hoogtestap van 10 m).

Voor instabiele condities:

$$\Delta h = 15 \left( \frac{F_r}{u_z} \right)^{3/5} + z_b \quad (62)$$

Indien  $\Delta h > z_b + \Delta z$  dan is de resterende warmte-inhoud van de pluim:

$$F_r = \left( \frac{\Delta h^{5/3} - z_t^{5/3}}{15} \right) u_z \quad (63)$$

Neutrale situaties:

$$\Delta h = \frac{39 F_r^{3/5}}{u_z} + z_b \quad (64)$$

Indien  $\Delta h > z_b + \Delta z$  dan is de resterende warmte-inhoud van de pluim:

$$F_r = \frac{(\Delta h^{5/3} - z_t^{5/3}) u_z}{39} \quad (65)$$

en voor stabiele condities:

$$\Delta h = \left( \frac{1.8 F_r T_a}{u_z \frac{\delta \theta_a}{\delta z}} + z_b^3 \right)^{1/3} \quad (66)$$

Indien  $\Delta h > z_b + \Delta z$  dan is de resterende warmte-inhoud van de pluim:

$$F_r = \frac{(\Delta h^3 - z_t^3) u_z \frac{\delta \theta_a}{\delta z}}{1.8 T_a} \quad (67)$$

Per laagje van 10 m dik worden pluimstijging en buoyancy verlies berekend totdat de buoyancy 0 is geworden. Per laagje wordt bepaald of de atmosfeer stabiel is of niet. Indien een stabiele laag is gepenetreerd, is de menglaag verlaten, en zal in de erboven liggende lagen geen turbulentie van betekenis aanwezig zijn. Om praktische problemen bij de uitwerking te voorkomen wordt in stabiele lagen voor de temperatuurgradient een minimale waarde van 0.005 K/m gehanteerd.

Indien de potentiële temperatuurgradient meer dan 0.005 K/m bedraagt en de pluim boven de menglaag uitkomt, dan wordt de pluimstijging voor stabiele condities geselecteerd. In de stabiele pluimstijgformule is  $T_a$  de temperatuur op 10 m hoogte. Indien een stabiele laag is gepenetreerd, blijft de pluimstijging stabiel. In andere gevallen is de parameter C uit (58) van belang. Indien  $C > 1$  en de mennghoogte  $> 500$  m dan wordt de convectieve pluimstijging formulering geselecteerd, anders de formulering voor neutrale condities.

De volgorde voor het hanteren van pluimstijgformules tijdens het stijgtraject van de pluim is:

- 1) Bereken de totale hoeveelheid reeds verbruikte buoyancy aan de onderkant van een 10 m dikke sublaag:  

$$F_{\text{verbruikt}} = F_{\text{start}} - F_{\text{rest}}$$
- 2) Bereken met formule (59), (60) of (61) de fictieve pluimstijging vanaf de schoorsteenmond, gebruik makend van de lokale windsnelheid en temperatuurgradiënt, die heerst in de laag waar de pluim doorheen stijgt en de verbruikte hoeveelheid buoyancy. De op deze wijze berekende  $\Delta H_f$  is de pluimstijging, die wordt bereikt met het verbruikte vermogen als de wind en temperatuurcondities over de hele atmosfeer gelijk zouden zijn aan de lokale waarden.
- 3) Bereken met de maximale pluimstijging vanaf de schoorsteenmond,  $\Delta H_{\text{max}}$ , gebruik makend van de lokale windsnelheid en temperatuurgradiënt, die heerst in de laag waar de pluim doorheen stijgt en de startwaarde van de buoyancy.
- 4) Bereken het verschil  $\Delta H_{\text{max}} - \Delta H_f$ . Indien dit verschil groter is dan de sublaagdikte (10 m) heeft de pluim nog voldoende buoyancy om door de actuele sublaag heen te stijgen.
- 5) Bereken de resterende hoeveelheid buoyancy, nadat de pluim door de sublaag is heengestegen. Dit is het verschil tussen de startwaarde en de verbruikte waarde aan de bovenkant van de sublaag. De verbruikte waarde aan de bovenkant van de sublaag kan worden uitgerekend met formule (59), (60) of (61) met dien verstande dat F de verbruikte hoeveelheid buoyancy is en  $\Delta H = \Delta H_f + \Delta z$ , met  $\Delta z$  de sublaagdikte van 10 m.
- 6) Herhaal bovengenoemde stappen totdat de buoyancy is verbruikt.

N.B. Aan het begin van bovengeschetste procedure is de pluimhoogte gelijk aan de schoorsteenhoogte. Tijdens iedere sequentie van de stappen 1 tot en met 5 stijgt de pluim 10 m, totdat de buoyancy is verbruikt. Na de laatste stap is de additieve pluimstijging de waarde van het berekende hoogteverschil in stap 4.

### 3.9 Inversie penetratie

De berekening van de penetratie in een stabiele laag door de rookpluim geschiedt analoog aan de aanbevelingen van Briggs (1984). Dit houdt in dat de hoogte van de pluimas wordt vergeleken met de hoogte van de top van de menglaag. Voor de afmetingen van de rookpluim wordt aangenomen dat de verticale pluimafmeting even groot is als de horizontale stijging van de pluim. De beperking tot de horizontale stijging is een toevoeging binnen deze modelformulering om onrealistische pluimafmetingen te voorkomen in situaties met weinig turbulentie en lagere windsnelheden.

De fraktie P van de pluim die onder de top van de menglaag blijft is dan:

$$P = \frac{z_i - z_b}{z_t - z_b} \quad (68)$$

$z_t$  en  $z_b$  zijn respectievelijk de hoogte van de pluimtop en de pluimbasis,  $z_i$  is de menglaaghoogte.

Voor  $z_t$  en  $z_b$  geldt:

$$\Delta h = z_t - z_b \quad (69)$$

Indien er gedeeltelijke penetratie plaatsvindt, wordt de effectieve schoorsteenhoogte voor dat deel der pluim dat binnen de atmosferische grenslaag blijft gelijkgesteld aan het massazwaartepunt van dit pluimdeel.

### 3.10 “Stacktip downwash” en impulsstijging

De pluimdaling door schoorsteeninvloed is afhankelijk van de verhouding tussen uittreesnelheid van het rookgas ( $v_s$ ) en windsnelheid op schoorsteenhoogte ( $u_s$ ). Uit laboratoriumproeven is een theoretisch verband afgeleid voor situaties waarin  $v_s/u_s \leq 2$ . Uit waarnemingen blijkt, dat er geen stacktip downwash optreedt als  $v_s/u_s > 4$ . Met behulp van lineaire interpolatie wordt voor tussenliggende toestanden ook een antwoord gevonden.

Indien  $v_s/u_s \leq 2$  geldt

$$\Delta H_{schoorsteen} = -z_m = -1.6D C_d \quad (70)$$

Hierin is

$$C_d = \begin{cases} 1.2 + \frac{9.8}{Re} & Re < 200000 \\ 0.6 & Re > 200000 \end{cases} \quad (71)$$

met

$$Re = \frac{u_s D P_b G_{lucht}}{\mu R T_a} \quad (72)$$

Indien  $2 \leq v_s/u_s \leq 4$  wordt de downwash berekend door lineair te interpoleren tussen de waarde volgens (70) en de waarde 0. Dus in dat geval geldt

$$\Delta H_{schoorsteen} = -z_m \left[ 2 - \frac{v_s}{2u_s} \right] \quad (73)$$

De atmosferische druk is hierbij 105 hPa, de gasconstante is 8,31 en  $T_0$  is de omgevingstemperatuur.

De impulsstijging wordt bepaald volgens het volgende schema:

- (1) Bepaal of er stacktip downwash optreedt. Indien dit het geval is, wordt er geen impulsstijging bepaald. Vervolg anders het schema.
- (2) Maak een eerste schatting van de warmtestijging van de pluim.
- (3) Bepaal impulsstijging volgens de formule:

$$\Delta H_{impuls} = \frac{3D v_s}{u_s} \quad (74)$$

Indien de atmosferische conditie instabiel of neutraal is, geeft bovenstaande formule een waarde voor de impulsstijging. Echter voor stabiele condities wordt ook impulsstijging berekend volgens de formule:

$$\Delta H_{impuls} = \sqrt[3]{\frac{0.646D^2 v_s^2 T_a^{3/2}}{T_0 u_s \left(\frac{d\theta}{dz}\right)^{1/2}}} \quad (75)$$

In deze gevallen geeft het minimum van beide berekeningen een waarde voor de impulsstijging.

- (4) Indien

$$\Delta H_{warmte} < \Delta H_{impuls} \quad (76)$$

wordt de pluimstijging gelijk gesteld aan de impulsstijging. Is echter

$$\Delta H_{warmte} > \Delta H_{impuls} \quad (77)$$

dan wordt slechts de warmtestijging berekend volgens een geavanceerde methode. Er wordt dan dus geen aparte term voor impulsstijging aan de pluimstijging toegevoegd. Opgemerkt dient te worden, dat de toegepaste formules voor warmtestijging gefit zijn aan praktijksituaties met warme bronnen. De formules dekken voor dit soort bronnen tevens de impulsstijging.

### 3.11 Droge en natte depositie processen

Geëmitteerde gassen en deeltjes (aerosolen) kunnen uit de atmosfeer verwijderd worden door een drietal mechanismen:



- 1 droge depositie: het verwijderen van stoffen uit de atmosfeer aan het aardoppervlak, bijvoorbeeld middels opname door planten of hechting aan het oppervlak
- 2 natte depositie: het opnemen van stoffen in neerslag, waarna de verontreinigde neerslag op het aardoppervlak terecht komt; hiervoor bestaan twee mechanismen: uitwassen (opname en verwijdering van verontreiniging door neerslag onder een wolk) en uitregenen (opname en verwijdering van verontreiniging door neerslag in een wolk). Uitwassen is een proces dat vooral dicht bij bronnen een rol speelt, terwijl uitregenen op grotere afstand van een bron van belang kan zijn.
- 3 omzetting van gasvormige verontreiniging door chemische reacties (zoals vorming van aerosol of een andere gasvormige component).

Het derde proces zal hier buiten beschouwing worden gelaten.

De snelheid van depositie (zowel nat als droog) is sterk afhankelijk van de beschouwde component. Voor gassen spelen de fysische en chemische eigenschappen van het gas een bepalende rol voor het depositieproces. Voor deeltjes is vooral de grootte van het deeltje van belang.

Bij het in rekening brengen van depositieprocessen in de verspreiding van geloosde stoffen zal daarom onderscheid gemaakt worden tussen de depositie van gassen enerzijds en van deeltjes anderzijds.

In deze beschrijving zal in het kort worden aangegeven hoe depositieprocessen (zowel droog als nat) wiskundig beschreven kunnen worden voor gassen en deeltjes. Vervolgens wordt een beschrijving gegeven hoe deze processen verwerkt moeten worden bij het berekenen van het concentratiepatroon rond een bron. Waar mogelijk hebben we getracht bij de formulering van de depositie processen zoveel mogelijk aan te sluiten bij het Operationele Prioritaire Stoffen model (OPS-model) van het RIVM.

### 3.11.1 Droge depositie

De droge-depositieflux,  $F$ , van een gas of aerosol (de hoeveelheid die per tijdseenheid terecht komt op een oppervlakte-eenheid) is te bepalen uit een berekende of gemeten concentratie,  $C$ , en een depositiesnelheid,  $v_d$ :

$$F(x, y) = C(x, y) \cdot v_d \quad (78)$$

De depositiesnelheid  $v_d$  hangt onder andere af van de atmosferische stabiliteit en de beschouwde component. Men kan ervoor kiezen om voor de berekening van een jaargemiddelde depositie te rekenen met een stofafhankelijke jaargemiddelde  $v_d$ . In het Nationaal Model (referentiemodel) kiezen we echter voor de benadering om per uur de grootte van  $v_d$  te bepalen en de depositieberekeningen uit te voeren.

### V<sub>d</sub> voor gassen

De depositiesnelheid van een gas (bijvoorbeeld SO<sub>2</sub>) kunnen we schatten door gebruik te maken van het zogenaamde weerstandschema (Wesely en Hicks, 1977):

$$v_d = (R_a + R_b + R_c)^{-1} \tag{79}$$

Het turbulente transport van een gas van een referentiehoogte z<sub>0</sub> boven het aardoppervlak tot de hoogte waar de windsnelheid 0 is (z<sub>0</sub>) bepaalt de weerstand R<sub>a</sub>. De waarde van R<sub>a</sub> is als volgt te berekenen:

$$R_a = \frac{1}{\kappa u^*} (\ln(z/z_0) - \Psi(z/L) + \Psi(z_0/L)) \tag{80}$$

met Ψ(z/L) een functie voor stabiliteitscorrectie, die afhankelijk is van de Monin-Obukhov lengteschaal. Het referentiemodel berekent voor elk uur de waarde van de wrijvingsnelheid u\* en de Monin-Obukhovlengte L.

In het laagje dat begrensd wordt door z<sub>0</sub> vindt transport van gassen plaats door moleculaire diffusie. De bijbehorende weerstand R<sub>b</sub> luidt als volgt:

$$R_b = \frac{2}{\kappa u^*} \left( \frac{Sc}{Pr} \right)^{2/3} \tag{81}$$

met Sc en Pr de dimensieloze kengetallen van Schmidt en Prandtl. Pr heeft de waarde 0.72 voor alle beschouwde gassen. Tabel 1 geeft enige waarden voor Sc.

Uit deze formulering blijkt dat de berekende depositiesnelheid tevens afhankelijk is van de gekozen referentiehoogte z<sub>0</sub>; een parameter waarvoor een waarde gekozen moet worden. In het Nationaal Model is de hiervoor 50 m gekozen in navolging van het OPS model.

Tabel 1 Waarden voor Sc voor enige gassen

	Component	Sc
1	deeltjes -	
2	SO <sub>2</sub>	1,25
3	NO <sub>2</sub>	1,07
4	NH <sub>3</sub>	0,68
5	NO	0,86
6	HCl	0,94
7	HBr	1,41
8	HF	0,70
9	B (gasvormig)	0,51
10	Se (gasvormig)	1,39
11	Hg (gasvormig)	2,21

R<sub>c</sub> geeft de weerstand van het oppervlak tegen depositie aan en is onder andere afhankelijk van de toestand van het oppervlak (nat/droog), het tijdstip van de dag en het seizoen. Tabel 2 geeft

enige waarden voor  $R_c$  die van toepassing zijn op de Nederlandse situatie (Erisman, 1992). Het zomerhalfjaar loopt daarbij van 1 april tot en met 30 september; de dagperiode wordt gekozen indien de globale straling groter dan nul is, anders gelden de nachtwaarden.

Tabel 2 Waarden voor  $R_c$  (in  $s\ m^{-1}$ ) voor enige gassen ingedeeld naar seizoen en tijdstip van de dag

	zomer		winter	
	dag	nacht	dag	nacht
SO <sub>2</sub>	45	10	38	20
NO <sub>2</sub>	230	870	630	850
NH <sub>3</sub>	28	15	33	35
NO	2000		2000	
HCl	15		15	
HBr	15		15	
HF	15		15	
B (gas)	50		50	
Se (gas)	50		50	
Hg (gas)	50		50	
benzeen	10000		10000	
tolueen	10000		10000	

### $V_d$ voor deeltjes

Drie processen spelen, naast het turbulent transport, een rol bij de droge depositie van deeltjes:

- 1 uitzakken: onder invloed van de zwaartekracht en wrijving met de lucht dalen deeltjes met een eenparige valsnelheid neer uit de atmosfeer
- 2 impactie: door traagheid ten gevolge van zijn massa is een deeltje soms niet meer in staat een afbuigende luchtstroom te volgen en kan vervolgens op het aardoppervlak terechtkomen
- 3 Brownse diffusie: deeltjes vertonen (net als gasmoleculen) willekeurige bewegingen; naarmate deze groter worden, is de kans om het aardoppervlak te raken en daar achter te blijven groter.

Al deze processen zijn afhankelijk van de grootte van het deeltje.

Om de depositiesnelheid van aerosolen te beschrijven als functie van de deeltjesgrootte en turbulent transport in de atmosfeer is een aantal modellen in omloop. Wij hanteren het (empirische) model van Sehmel and Hodgson (1980), dat ook in het OPS-model wordt toegepast (Van Jaarsveld, 1989).

De depositiesnelheid  $v_d$  is door Sehmel en Hodgson als volgt gedefinieerd:

$$v_d = v_t \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)^{-1} \quad (82)$$

waarin  $v_t$  de valsnelheid van een deeltje voorstelt onder invloed van de zwaartekracht (volgens de wet van Stokes)

$$v_t = \frac{\rho_{deeltje} g d^2}{18\mu_{lucht}} \quad (83)$$

en  $\alpha$  een verkorte schrijfwijze is van

$$\alpha = e^{-\frac{v_t \cdot Int}{u^*}} \quad (84)$$

De term  $Int$  beschrijft twee dimensieloze weerstanden tegen depositie van deeltjes en is bepaald door

$$\begin{aligned} Int &= \int_z^{z_0} \frac{u^*}{(\epsilon + D)} dz + \int_{z_0}^0 \frac{u^*}{(\epsilon + D)} dz \\ &= Int_1 + Int_3 \end{aligned} \quad (85)$$

waarbij  $\alpha$  de turbulente eddy-diffusiecoëfficiënt weergeeft en  $D$  de Brownse diffusiecoëfficiënt, die afhankelijk is van de deeltjesgrootte. De eerste term,  $Int_1$ , beschrijft de weerstand ten gevolge van turbulent transport (in deze laag is  $\epsilon \gg D$ ) en  $Int_3$  door diffusie. De term  $Int_3$  geeft de weerstand tegen depositie nabij het aardoppervlak weer en is sterk afhankelijk van de deeltjesgrootte. Sehmel en Hodgson geven hiervoor een uitdrukking, die sterk empirisch van karakter is.

Principieel kan gebruik gemaakt worden van een numerieke integratie-methode om de weerstand tegen depositie als gevolg van turbulent transport op te lossen. Het is mogelijk om dit deel te vervangen door de weerstand  $R_a$ , zoals die ook gehanteerd wordt bij de bepaling van  $v_d$  van gassen. Dit heeft als voordeel dat het turbulente transport op uniforme wijze wordt uitgerekend voor alle depositie- en verspreidingsprocessen.

In plaats van de numerieke oplossing van  $Int_1$  kan de volgende analytische oplossing gebruikt worden:

$$Int_1 = -u^* R_a \quad (86)$$

$R_a$  wordt berekend op de referentiehoogte van 50 m (of 10 m indien  $\sigma_z > z_i$ ).  $Int_3$  kan berekend worden middels (met  $t$  als hulpvariabele:)

$$Int_3 = -\exp(-378.051 + 16.498 \ln(Sc) + a \ln(t) - 12.804 \ln(100d))$$

$$a = -11.82 - 0.2863 \ln(t) + 0.32262 \ln \frac{d}{z_0} - 0.3385 \ln \left( \frac{Br}{z_0 u^*} \right) \quad (87)$$

$$Br = \frac{2.435 \cdot 10^{-17}}{d} \left[ 1 + \frac{0.1663 \cdot 10^{-6}}{d} + \frac{5.289 \cdot 10^{-8}}{d} e^{-d(8.3221 \cdot 10^{-6})} \right]$$

$$Sc = \frac{v}{Br \rho_{air}}$$

$$t = d^2 \frac{u^{*2} \rho_{part} \rho_{air} 10^{-8}}{18v^2} \quad (88)$$

d: deeltjes diameter. Br: Brownse diffusiecoëfficiënt  $z_0$ : ruwheid; v: viscositeit van lucht.

Om de depositie van stof geëmitteerd door een centrale te berekenen is het noodzakelijk te weten hoe de grootteverdeling is van het geëmitteerde stof. Het OPS-model hanteert 3 typen verdelingen van geloosd stof (fijn, middel en grof stof) die gekarakteriseerd zijn door opdeling in 5 klassegrootten; zie Tabel 3.

KEMA heeft tevens onderzoek gedaan naar de verdeling van deeltjesgroottes voor stofemissies van kolengestookte centrales (Meij, 1990). De verdelingen zijn sterk verschillend voor centrales met of zonder een rookgasontzwavelingsinstallatie (R OI). In Tabel 4 is een verdeling weergegeven in een vijftal klassen voor emissies van centrales met of zonder R OI.

Tabel 3 Verdelingen van fijn, middel en grof stof over 5 klassen deeltjesgroottes in het OPS-model. Bij de klasse-indeling staat tussen haakjes vermeld welke diameter als karakteristieke waarde voor die klasse gebruikt moet worden bij berekeningen

	verdeling over klassen (in massa-%)				
	I	II	III	IV	V
	<0.95 $\mu\text{m}$ [0.2 $\mu\text{m}$ ]	0.95-4 $\mu\text{m}$ [1.9 $\mu\text{m}$ ]	4-10 $\mu\text{m}$ [6.3 $\mu\text{m}$ ]	10-20 $\mu\text{m}$ [14 $\mu\text{m}$ ]	>20 $\mu\text{m}$ [30 $\mu\text{m}$ ]
fijn	70	20	5.5	2.5	2.0
middel	53	28	11.5	4.2	3.3
grof	42	33	14.5	5.9	4.6

Tabel 4 Verdeling van de deeltjesgrootte (in %) van stof geloosd door een centrale zonder en met ROI (fit van gegevens door Meij, 1990). Bij de klasse-indeling staat tussen haakjes vermeld welke diameter als karakteristieke waarde voor die klasse aangenomen is

Klasse →	grootteverdeling over klassen (in massa-%)				
	I <0.05 μm [0.02 μm]	II 0.05-0.95 μm [0.2 μm]	III 0.95-4 μm [1.9 μm]	IV 4-10 μm [6.3 μm]	V 10-20 μm [14 μm]
geen ROI	15	27	27	26	5
met ROI	38	30	22	10	0

### 3.11.2 Natte depositie

Het verwijderen van gassen en deeltjes door neerslag kan in vereenvoudigde vorm worden weergegeven als

$$\frac{dC}{dt} = -\Lambda \cdot C \tag{89}$$

waarbij  $\Lambda$  de scavengingcoëfficiënt wordt genoemd.

Dichtbij de bron dient  $\Lambda$  zo gekozen te worden dat deze scavengingcoëfficiënt een goede beschrijving geeft van het uitwasproces. Voor deeltjes is  $\Lambda$  dan te benaderen volgens Janssen en ten Brink (1985) als

$$\Lambda_d = \epsilon \lambda_0 R^{-\beta} \tag{90}$$

met  $R$  de regenintensiteit (in mm hr<sup>-1</sup>). Terwijl voor gassen geldt:

$$\Lambda_g = \lambda_0 D_g^{1-\alpha} R^{1-\beta} \tag{91}$$

met  $D_g$  de diffusiecoëfficiënt van het betreffende gas in lucht. De vangstefficiency ( $\epsilon$ ) dient te worden toegevoegd als vermenigvuldigingsfactor. Deze varieert van 1 voor grote deeltjes tot 0.001 voor submicrondeeltjes.

Hiervoor is een tabel beschikbaar op basis van Slinn's publikaties: Deze gehanteerde tabel voor stofdepositie-parameters is als volgt:

	diameter					vangsteff (natte depo) $\epsilon$					gewichtsfracties				
	0.2E-6	1.9E-6	6.3E-6	14.0E-6	30.0E-6	0.002	0.1	1.0	1.0	1.0	70	20	5.5	2.5	2.0
fijn stof	0.2E-6	1.9E-6	6.3E-6	14.0E-6	30.0E-6	0.002	0.1	1.0	1.0	1.0	53	28	11.5	4.2	3.3
middelfijn stof	0.2E-6	1.9E-6	6.3E-6	14.0E-6	30.0E-6	0.002	0.1	1.0	1.0	1.0	42	33	14.5	5.9	4.6
grof stof	0.2E-6	1.9E-6	6.3E-6	14.0E-6	30.0E-6	0.002	0.1	1.0	1.0	1.0	15	27	27	26	5.0
vliegast voor ROI	0.02E-6	0.2E-6	1.9E-6	6.3E-6	14.0E-6	0.004	0.002	0.1	1.0	1.0	38	30	22	10	0.0
vliegast na ROI	0.02E-6	0.2E-6	1.9E-6	6.3E-6	14.0E-6	0.004	0.002	0.1	1.0	1.0					

Tabel 5 geeft enige waarden van de parameters  $\lambda_0$ ,  $\alpha$  en  $\beta$ . Voor waarden van  $D_g$  zie onder andere Van Jaarsveld, (1989) en Janssen en ten Brink (1985).

Tabel 5 Parameters voor de berekening van  $\Lambda_d$  en  $\Lambda_g$  volgens Janssen en ten Brink (1985). (levert voor  $\Lambda$  als eenheid op  $hr^{-1}$ , wanneer  $D_g$  in  $cm^2 s^{-1}$  en  $R$  in  $mm hr^{-1}$  gegeven zijn)

	$\lambda_0$	$\alpha$	$\beta$	$D_g$	$W$
deeltjes	1.31	-	0.18	-	$1.0 \cdot 10^6$
SO <sub>2</sub>	1.14	0.26	0.36	0.136	$7.5 \cdot 10^4$
NO <sub>x</sub>	1.14	0.26	0.36	0.160	$1.0 \cdot 10^4$
NH <sub>3</sub>	1.14	0.26	0.36	0.240	$1.0 \cdot 10^6$
HCl	1.14	0.26	0.36	0.190	$1.0 \cdot 10^6$
HBr	1.14	0.26	0.36	0.110	$1.0 \cdot 10^6$
HF	1.14	0.26	0.36	0.230	$1.0 \cdot 10^6$
B (gasv)	1.14	0.26	0.36	0.150	$5.0 \cdot 10^4$
Se (gasv)	1.14	0.26	0.36	0.110	$1.2 \cdot 10^4$
Hg (gasv)	1.14	0.26	0.36	0.071	$1.2 \cdot 10^4$

Neerslag die door een gaussische pluim valt, levert als natte depositie de volgende hoeveelheid op (Hanna, 1982):

$$F(x, y) = \frac{\Lambda Q(x)}{\sqrt{2\pi} \sigma_y \mu} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \quad (92)$$

Deze formule geldt eigenlijk alleen voor een pluim die zich in de menglaag bevindt; de waarde van  $\sigma_y$  is dan ook de waarde die in de menglaag geldt. Voor afstanden verder van de bron is uitwassen van gering belang en dient  $\Lambda$  het uitregenproces weer te geven. Als grens voor het gebied waar uitregenen belangrijk wordt kiezen we (arbitrair) die afstand tot de bron waarbij de pluim zich over de gehele menglaag  $z_i$  heeft verspreid. Als criterium nemen we voor deze afstand  $H_{\text{eff}} + 2 \sigma_z(x) = z_i$ . Indien de pluim zich (grotendeels) boven de menglaag bevindt, wordt eveneens aangenomen, dat het proces van uitregenen domineert ongeacht de afstand tot de bron. Ook voor het uitregenproces wordt formule (92) toegepast.

Voor respectievelijk uitregenen en uitwassen moet voor  $Q(x)$  de emissiefractie ingevuld worden voor respectievelijk het pluimdeel boven de menglaag en in de menglaag (!).

Voor zowel  $\Lambda_d$  als  $\Lambda_g$  kan dan gebruikt worden

$$\Lambda = W \frac{R}{z_i} \quad (93)$$

met  $z_i$  de menghoogte (in m),  $R$  de regenintensiteit (nu in  $m hr^{-1}$ ) en  $W$  een gegeven verhouding tussen de luchtconcentratie en de neerslagconcentratie. Voor  $W$  zijn verschillende waarden in omloop die afhankelijk zijn van de beschouwde component (zie Tabel 5).

### 3.11.3 In rekening brengen van depositie op concentraties

Tot nu toe zijn slechts vergelijkingen gegeven waarmee de depositie kan worden berekend. Het verlies van massa uit de pluim door depositie moet ook nog in rekening gebracht worden om de juiste concentraties rond de bron te berekenen. Om deze verliesterm te verwerken gebruiken we het concept van bronvermindering<sup>1</sup>. Dat wil zeggen: het verlies dat we berekenen ten gevolge van depositie brengen we in mindering op de bronsterkte om de concentratie op een bepaalde afstand tot de bron te berekenen.

Voor droge depositie kunnen we de bronsterkte als volgt corrigeren voor een afstand x tot de bron (Hanna, 1982):

$$Q(x) = Q(0) \left[ e^{-\left[ \int_0^x \frac{dx}{h^2 / (2\sigma_z^2)} \right] \frac{v_d \sqrt{2}}{u \sqrt{\pi}}} \right] \quad (94)$$

met h de effectieve bronhoogte,  $\sigma_z$  de standaardafwijking van de verticale verspreiding, u de windsnelheid en  $v_d$  de depositiesnelheid op receptorhoogte (2 m).

We gebruiken de benadering, zoals toegepast in het OPS model (brondepletie met oppervlakte correctie). Dit houdt in dat het concentratieprofiel vanaf het niveau van 50 m naar grondniveau gecorrigeerd wordt voor het verlies aan materiaal. Deze correctie heeft alleen effect op de grondconcentraties. Het model voorziet in een overschakelmoment van een referentiehoogte  $z_d$  van 50 m naar 10 m. Indien  $\sigma_z > z_i$ , dan wordt een referentiehoogte van 50 m gekozen, anders wordt een referentiehoogte van 10 m gehanteerd. Deze constructie is specifiek voor puntbronnen gekozen omdat -vooral voor lagere bronnen- de concentratie gradient in de onderste 50 m sterk kan zijn door een kleine waarde van  $\sigma_z$ . De correctie wordt berekend als:

$$C_{surface} = C[z_d] \cdot \left( 1 - (1 - \phi) \cdot \left( 1 - e^{-\frac{t}{z_d R_d [2]}} \right) \right) \quad (95)$$

met:

- 
1. Behalve het concept van bronvermindering (“source depletion”) bestaan er nog enkele methoden om depositie in rekening te brengen zoals het concept van “oppervlaktevermindering” (“surface depletion”), het concept van de verschoven pluimhoogte (“tilted plume”) en van partiële pluimreflectie. Oppervlaktevermindering geeft een fysisch betere beschrijving van het depositieproces, maar is moeilijker in te bouwen in een gaussisch pluimmodel. Wanneer depositiesnelheden klein zijn ten opzichte van de turbulente verspreiding zijn verschillen tussen berekende concentraties met bronvermindering en oppervlaktevermindering gering. Het verschoven pluimconcept en partiële pluimreflectie vinden nauwelijks toepassing.



$$\phi = \frac{R_a[2] + R_b + R_c}{R_a[z_d] + R_b + R_c} \quad (96)$$

In (95) wordt voor  $z_d$  de receptorhoogte van 2 m ingevuld;  $R_a(z_d)$  in (96) wordt berekend op de referentiehoogte van 50 m (of 10 m indien  $\sigma_z > z_i$ ). Het toepassen van brondepletie met oppervlaktecorrectie leidt tot grondconcentraties die 2 tot 10% lager zijn dan zonder oppervlaktecorrectie.

Voor stof zijn geen waarden gedefinieerd voor de weerstandscoefficienten  $R_c$ .

De oppervlaktecorrectiefactor  $\phi$  is daarom in het referentiemodel niet toegepast voor stof;  $\phi$  in het referentiemodel is dan dus gelijk gesteld aan 1.

Voor natte depositie kunnen we de bronsterkte verminderen door

$$Q(x) = Q(0)e^{\frac{-\Lambda x}{u}} \quad (97)$$

met  $u$  de windsnelheid. Bij neerslag zal er tevens droge depositie plaats vinden en moeten we de bronsterkte voor deze beide processen gelijktijdig corrigeren:

$$Q(x) = Q(0)e^{\frac{-\Lambda x}{u}} \left[ e^{\int_0^x \left( \sigma_z e^{\frac{h^2}{2\sigma^2 z}} \right)^{-1} dx} \right] \frac{v_d \sqrt{2}}{u \sqrt{\pi}} \quad (98)$$

$v_d$  is hier de depositiesnelheid op receptorhoogte (2 m). De concentratie op een punt  $(x,y)$  is dan gelijk aan:

$$C(x,y) = Q(x)G(x,y) \quad (99)$$

met  $G(x,y)$  de verspreidingsterm (inclusief inversiepenetratie) van het gaussisch pluimmodel. De scavengingcoefficient  $\Lambda$  in formule (97) en (98) bevat zowel de waarde voor uitwassen als uitregenen. Voor de broncorrectieterm, waarmee de grondconcentraties worden gecorrigeerd is dit niet geheel juist, maar er wordt de voorkeur gegeven aan het correct uitrekenen van de natte depositieterm boven het principiële juist corrigeren van de grondconcentraties; deze correctieterm heeft dicht bij de bron weinig invloed op de grondconcentraties.

### 3.11.4 Implementatie

In het OPS model worden de concentraties, berekend op *de referentiehoogte* van 50 m, gebruikt bij het bepalen van de depositie. Voor puntbronnen echter wordt in dit model dichtbij

de bron de grondconcentratie gebruikt. Het concentratiepatroon is bij de bron immers sterk hoogte afhankelijk, daarom wordt ook in het referentiemodel - in navolging van het OPS - in plaats van de hoogte van 50 m een lagere waarde genomen: wij kiezen voor de waarde 10 m totdat  $\sigma_z > z_i$  wordt.

Daar de keuze van 50 m tamelijk willekeurig is, is nagegaan hoe gevoelig het model voor deze keus is. Het model is daarom ook gedraaid met een waarde van 25 m. De berekende SO<sub>2</sub> deposities zijn in dat geval 2 à 2,5 % lager voor een 150 m hoge bron. Voor een 50 m bron is het verschil wat groter (ongeveer 5%). De preciese referentiehoogte is dus niet sterk van invloed op het modelresultaat voor hoogte bronnen. Bij lage bronnen kan dit anders liggen. Daar is de (berekenings)hoogte van diverse parameters ( $R_a$ ,  $v_d$ , en  $z_d$  zelf) van belang; zowel  $v_d$  als  $R_a$  zijn hoogteafhankelijk, maar de depositieflux zelf is natuurlijk constant op elke hoogte. Door het depositieproces stelt zich een gradient in met een tijdconstante  $z_d * R_a$  die in formule (95) door een e-macht is aangegeven. De concentratie op leefniveau is bij in rekening brengen van depositie dus lager dan zonder het depositieproces te verdisconteren (een tweede oorzaak van lagere concentraties is het massaverlies dat door formule (98) wordt gegeven). De weerstand ten gevolge van turbulent transport  $R_a$  wordt daarom in formule (94) en (95) op 2 m berekend, maar in formule (96) op de referentiehoogte van 50 m (in feite geldig voor een uniform concentratieprofiel). Maar omdat deze 50 m in gevallen waar de concentratieverdeling nog niet uniform is (criterium:  $\sigma_z/z_i < 1$ ) te hoog kan zijn, wordt in die gevallen (arbitrair) 10 m gehanteerd.

Wat de volgorde betreft: eerst dient de profielcorrectie berekend te worden, en daarna de depositiehoeveelheid.

De *depositie van NO<sub>x</sub>* wordt berekend als depositie van NO<sub>2</sub>; als uitgangskoncentratie wordt de NO<sub>x</sub> concentratie genomen. Het afzonderlijk bepalen van de depositie van NO en NO<sub>2</sub> in combinatie van omzetting van NO naar NO<sub>2</sub> en daarna sommeren van de twee termen, lijkt weinig zinvol daar het verschil klein geacht wordt ten opzichte van de effecten van andere onzekere factoren (waaronder de weerstandswaarden van NO en NO<sub>2</sub>).

De berekening van het gedeelte van de NO<sub>2</sub> dat door reactie met ozon wordt gevormd, wordt uitgevoerd met de hoeveelheid geëmitteerd NO<sub>x</sub> verminderd met de fractie initieel NO<sub>2</sub> (op deze manier wordt in feite alleen met omzetting van NO gerekend, hetgeen meer correct is). Het initieel aanwezige NO<sub>2</sub> wordt doorgerekend als een inerte component. De som van de bijdrage van verspreid initieel NO<sub>2</sub> en gevormd NO<sub>2</sub> (uit NO) is dan de uiteindelijke grondconcentratie.

Daar de natte depositie dichtbij de bron onwaarschijnlijk groot wordt, zijn twee arbitraire restricties ingebouwd:

- Op de bron zelf wordt de depositie nul verondersteld.
- dichtbij de bron is een afkapfunctie (als eerste orde benadering) aangenomen, die bij kleine waarden van  $\sigma_z$  voor een reductie van de natte depositie zorgt:

$$P_r = (\sigma_z) / (\sigma_z + 15);$$

$P_r$  is een correctiefactor, die de depositiegradient naar de bron toe aftopt; bij  $\sigma_z = 15$  m is  $P_r$  0.5; bij grotere waarden heeft deze  $\sigma_z$  nauwelijks invloed.

Deze functie is aangenomen om irreëel hoge deposities bij smalle pluimen te voorkomen. Uit uitwasproeven blijkt dat op 2 km afstand van de schoorsteen fracties pluimmateriaal uitregenen, die overeenkomen met berekende waarden, zonder afkapterm in vergelijking (91). Deze restrictie op de natte depositie (voor zowel uitwassen als voor uitregenen) voor smalle pluimen moet dus slechts binnen 2 km effect hebben.

Bij het berekenen van de natte depositie worden de bijdragen van uitregenen en uitwassen bepaald. Modelmatig dient er uitwassen (onder de wolk) en uitregenen (in de wolk) plaats te vinden. Uitwassen geschiedt voornamelijk op de korte afstand; uitregenen geschiedt voornamelijk op de grote afstand. Als (arbitrair) criterium voor uitwassen/uitregenen is nu opgenomen: indien meer dan 2/3 van de pluimmassa in de inversie is gepenetreerd OF (indien minder dan 2/3 in de inversielaag is gepenetreerd) als  $\sigma_z > z_i$  dan wordt uitsluitend uitregenen verondersteld. Anders treden zowel uitwassen als uitregenen op. In het programma is de overgang van uitwassen naar uitregenen via lineaire middeling van  $\Lambda$  vloeiend gemaakt middels definitie van de fractie in de wolk  $P_i$ :

$$P_i = \frac{H_{eff} + \sigma_z - z_i}{2\sigma_z} \quad (100)$$

met als begrenzing dat  $P_i$  tussen 0 en 1 moet liggen. Voor de waarde van  $\sigma_z$  moet de waarde binnen de menglaag genomen worden.  $P_i$  is dan de gewichtsfactor in:

$$\Lambda(x, y) = P_i \cdot \Lambda_{uitregenen} + (1 - P_i) \cdot \Lambda_{uitwassen} \quad (101)$$

Het effect van deze fractie  $P_i$  is dus een andere dan de inversiepenetratie. Inversiepenetratie vindt direkt bij de bron plaats; deze penetratiefactie wordt verrekend in de grondconcentraties en in de depositieprocessen. De fractie  $P_i$  wordt op grotere afstanden pas belangrijk, maar moet gezien worden als een correctieterm ten behoeve van het natte depositieproces ten einde te bepalen welke pluimfracties via uitwassen en uitregenen worden gedeponereerd. Grondconcentraties worden niet direkt met deze pluimfractie  $P_i$  gecorrigeerd, zoals met penetratie wel het geval is.

Als bronterm bij de berekening van de uitregenfractie en de uitwasfractie wordt de emissiefractie genomen, die in, respectievelijk boven de grenslaag aanwezig is.

Samengevat:

Indien de pluimfractie binnen de menglaag  $< 0.33$  is, dan berekent het model alleen het proces van uitregenen.

Indien de pluimfractie binnen de menglaag  $\geq 0.33$  is en  $\sigma_z > z_i$ , dan berekent het model alleen het proces van uitregenen.

Indien de pluimfractie binnen de menglaag  $> 0.33$  is en  $\sigma_z \leq z_i$ , dan berekent het model zowel het proces van uitwassen als het proces van uitregenen (met als gewichtsfactoren de pluimfractie **in** respectievelijk **boven** de menglaag).

Indien het regent, wordt zowel het proces van natte depositie als van droge depositie berekend: uitwassen en droge depositie geschiedt met de pluimfractie binnen de menglaag; uitregenen geschiedt met de pluimfractie boven de menglaag (1 - pluimfractie binnen de menglaag).

Het uitwassen wordt berekend met pluimparameters (effectieve pluimhoogte en pluimafmetingen) **binnen** de menglaag.

Het uitregenen wordt berekend met pluimparameters (effectieve pluimhoogte en pluimafmetingen) **boven** de menglaag.

De volgorde van de berekeningen is:

- Bereken de droge depositiesnelheid.
- Bereken (eventuele) natte depositiesnelheid (uitwas- en uitregensnelheid).
- Corrigeer de pluimmassa voor brontermverlies (zowel nat als droog).
- Bereken de grondconcentraties.
- Bereken dan de oppervlakte-profielcorrectieterm.
- Corrigeer de berekende grondconcentraties met deze term.
- Bereken dan de natte en droge depositiehoeveelheden.

### 3.11.5 $\sigma_y$ en $\sigma_z$ boven de inversiehoogte

Bij de berekening van de totale natte depositie worden twee termen bij elkaar opgeteld, te weten de natte depositie door uitwassen (onder de wolk) en de natte depositie door uitregenen (in de wolk). Om de hoeveelheid natte depositie ten gevolge van deze twee processen te berekenen zijn twee scavenging coëfficiënten nodig. Deze worden bepaald en opgeteld met de pluimfractie (tussen 0 en 1) als vermenigvuldigingsfactor. Voor beide processen is een waarde van  $\sigma_y$  noodzakelijk. Voor het proces onder de wolk (in de menglaag) wordt deze normaal berekend. Voor het proces in de wolk (dus boven de menglaag) is ook een waarde van  $\sigma_y$  nodig. Strikt genomen is de berekeningsmethode van  $\sigma_y$  en  $\sigma_z$  beperkt tot de menglaag. Bij de bepaling van de uitregenflux doet zich dus het probleem voor dat  $\sigma_y$  en  $\sigma_z$  boven de inversiehoogte berekend moeten worden. Daarvoor dienen dan waarden beschikbaar te zijn voor  $\sigma_v$ ,  $\sigma_w$  en tijdschaal  $T_1$ . In principe zijn hiervoor geen gevalideerde modellen voor beschikbaar. Dat betekent dat er min of meer arbitraire keuzen gemaakt moeten worden om het model sluitend te maken. Dit is opgelost door voor  $\sigma_{vs}$  en  $\sigma_w$  een constante waarde te hanteren van 0.1 m/s, voor  $\sigma_{vl}$  een constante waarde van 0,3 m/s te kiezen (dus geen realisatie uit een uniforme verdeling zoals toegepast voor de situatie binnen de grenslaag) en voor  $T_1$  de waarde voor binnen de grenslaag te hanteren. Deze worden dan gebruikt voor dispersie boven de grenslaag. Dit betekent dat de  $\sigma_y$ -waarde (vooral op grotere afstanden) wordt bepaald door de bijdrage van langzame fluctuaties in de windrichting,  $\sigma_{vl}$  (0.3 m/s). Het volledig uitregenen vlakbij de bron wordt afgekap, zoals eerder is aangegeven.

## 3.12 Vorming van $\text{NO}_2$ uit geëmitteerd NO

Stikstofoxiden ( $\text{NO}_x$ ) ontstaan bij verbranding van fossiele brandstoffen en vormen een belangrijk element in de luchtverontreinigingsproblematiek. Onder  $\text{NO}_x$  wordt verstaan de som van stikstofmonoxide (NO) en stikstofdioxide ( $\text{NO}_2$ ). Bij inhalatie is  $\text{NO}_2$  de meest scha-

delijke component, vooral voor personen met aandoeningen aan de luchtwegen (CARA-patiënten).

Bij verbranding in vuurhaarden ontstaat voornamelijk NO; in de atmosfeer reageert NO met ozon (O<sub>3</sub>) waarbij het gedeeltelijk wordt omgezet in NO<sub>2</sub> afhankelijk van de atmosferische omstandigheden. Tijdens het transport in de atmosfeer worden rookgassen verdund door turbulentie. NO<sub>2</sub>-concentraties op leefniveau ten gevolge van de emissie uit hoge schoorstenen worden derhalve bepaald door zowel verspreiding als omzetting in de atmosfeer; twee processen die gelijktijdig plaatsvinden. Een rekenmodel moet met beide processen rekening houden.

### 3.12.1 De AMvB-aanbeveling

Voor het schatten van NO<sub>2</sub>-concentraties is in het 'Besluit luchtkwaliteit stikstofdioxide' (Staatsblad, 1987) een model aanbevolen, dat een uitbreiding is op het reeds bestaande Nationaal Model (TNO, 1976, 1984). Hierin wordt de verspreiding analoog aan het Nationaal Model beschreven; het model bevat een module, die het aandeel van NO<sub>2</sub> aan de NO<sub>x</sub>-concentraties geeft op basis van de uit metingen afgeleide lange termijn gemiddelde NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub> verhouding in de achtergrond.

Dit model dat nauw aansluit bij het (oude) Nationaal Model, beschrijft de NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub> verhouding in de pluim onafhankelijk van de afstand tot de schoorsteen en onafhankelijk van de dag/nacht gang. Uit vliegtuigmetingen is echter bekend dat deze verhouding sterk verandert met de afstand tot de bron. De hoeveelheid zoninstraling bepaalt mede de NO<sub>2</sub>/NO<sub>x</sub> verhouding.

### 3.12.2 KLANOMOD

Daarom is bij de KEMA het model KLANOMOD ontwikkeld, dat eveneens aansluit bij het Nationaal Model, maar dat de omzettingsgraad wél afhankelijk stelt van bronafstand en van de hoeveelheid zoninstraling. Daar in KLANOMOD (Janssen et al, 1990) de resultaten van een groot aantal pluimmetingen met een meetvliegtuig zijn gebruikt, wordt gesteld dat KLANOMOD een verbetering is ten opzichte van het in de NO<sub>2</sub>-AMvB genoemde model voor wat betreft de toepassing op hoge bronnen.

KLANOMOD is een acroniem van KLAssificatie NO-omzetting MODel.

KLANOMOD is een model, dat is afgeleid van het oude Nationaal Model, maar waarin de NO<sub>2</sub>-fractie berekend wordt op basis van de resultaten van vele vliegtuigmetingen, die zijn uitgevoerd in rookpluimen van centrales. Echter, door de empirische klassificatie is het model feitelijk alleen toepasbaar voor die bronnen, waarvoor de omzettingsparameters zijn afgeleid, dat wil zeggen voor bronnen met relatief grote NO<sub>x</sub> emissies. In KLANOMOD is:

$$\frac{[NO_2]}{[NO_x]} = A[1 - e^{-\alpha x}] \quad (102)$$

waar A and  $\alpha$  empirisch zijn geklassificeerd. Daarom is in het referentiemodel gekozen voor een meer fundamentele benadering, die voor alle bronnen gebruikt kan worden, maar voor grote emissies dezelfde omzettingsgraden geeft als KLANOMOD.

### 3.12.3 Referentiemodel

De omzetting van NO in het referentiemodel gaat uit van de concentraties van NO<sub>x</sub> zoals die door de verspreidingsmodule berekend worden (Erbrink en Bange, 1991).

De oxydatie tot NO<sub>2</sub> verloopt volgens:



De fotodissociatie van NO<sub>2</sub> onder invloed van zonlicht verloopt volgens:



De verandering van de hoeveelheid NO<sub>2</sub> ten gevolge van beide reacties is:

$$\frac{\partial[NO_2]}{\partial t} = K_1[NO][O_3] - K_3[NO_2] \quad (105)$$

Indien aangenomen wordt dat er in de pluim fotochemisch evenwicht heerst, dan is de hoeveelheid gevormd NO<sub>2</sub> gelijk aan de hoeveelheid weggenomen NO<sub>2</sub> en is het rechter lid in de laatste vergelijking gelijk aan 0. Combinatie geeft:

$$[NO_2]^2 - \left( [NO_x] + [O_x] + \frac{K_3}{K_1} \right) [NO_2] + [NO_x][O_x] = 0$$

met  $[O_x] = [NO_2] + [O_3]$  (106)

en  $[NO_x] = [NO] + [NO_2]$

zodat de NO<sub>2</sub> concentratie op elk punt zijn te berekenen, indien K<sub>1</sub> (ppb<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>) en K<sub>3</sub> (s<sup>-1</sup>) gegeven zijn.

Zowel [O<sub>x</sub>] als [NO<sub>x</sub>] zijn constant in de pluim. De reactieconstante K<sub>3</sub> varieert van uur tot uur. Uit deze vergelijking is dus [NO<sub>2</sub>] te berekenen, uitgaande van constante [O<sub>x</sub>] en [NO<sub>x</sub>] concentraties. De reactieconstante K<sub>3</sub> is afhankelijk van de zoninstraling:

$$K_3 = 1,67 \cdot 10^{-2} \cdot e^{\frac{-0,575}{\cos\theta}} \cdot \text{reductiefactor} \quad (107)$$

Hierin is:

θ = zonnehoek.

reductiefactor = aanpassing K<sub>3</sub> voor bewolkingsgraad

De θ die in deze formule voorkomt wordt op de volgende manier uitgerekend:

$$\begin{aligned}
 \cos \theta &= \sin \delta \cdot \sin \phi + \cos \delta \cdot \cos \phi \cdot \cos t_n \\
 \delta &= 0,006918 - 0,399912 \cdot \cos d_h + 0,070257 \cdot \sin d_h \\
 &\quad - 0,006758 \cdot \cos 2d_h - 0,00907 \cdot \sin 2d_h \\
 &\quad - 0,002697 \cdot \cos 3d_h + 0,001480 \cdot \sin 3d_h
 \end{aligned}
 \tag{108}$$

Hierin zijn:

- $\phi$  = breedtegraad
- $\delta$  = declinatie van de zon
- $t_n$  = uurhoek

$d_h$  is een omrekeningsfactor om het dagnummer ( $d_n$ ) om te zetten naar een hoek in radialen.  $d_h$  en  $t_n$  worden op de volgende manier uitgerekend:

$$\begin{aligned}
 d_h &= \frac{2 \cdot \pi \cdot d_n}{365} \\
 t_n &= \left( \frac{\text{uur van de dag}}{12} - 1 \right) \cdot \pi
 \end{aligned}
 \tag{109}$$

De reductiefactor wordt op de volgende manier bepaald. De bewolgingsgraad heeft ook invloed op de  $K_3$ . Als er geen bewolking is zal de reductiefactor 1 zijn. Bij totale bewolking zal de reductiefactor 0,4375 zijn. Om de tussen liggende waarden te vinden kan lineair geïnterpoleerd worden. Over een traject van 0 naar 1 neemt de reductie af van 1 naar 0,4375. Het verschil ertussen is 0,5625. Vermenigvuldigen we dit met de bewolgingsgraad en trekken we dit af van de reductie bij een bewolgingsgraad van 0 dan vinden we de reductiefactor voor de  $K_3$ .

De reactieconstante  $K_1$  is afhankelijk van de temperatuur. De berekening van  $K_1$  geschiedt dan op de volgende manier:

$$K_1 = \frac{9,2 \cdot 10^5}{60000 \cdot T} \cdot e^{\frac{-1450}{T}}
 \tag{110}$$

De omzetting van NO speelt zich momentaan af. Toepassing van uurgemiddelde concentraties in de reactievergelijkingen leidt onvermijdelijk tot overschattingen. Ten behoeve van het model is daarom een experimentele uitdrukking afgeleid voor de momentane pluimdimensies ( $\sigma_m$ ) als functie van de looptijd  $t$ :

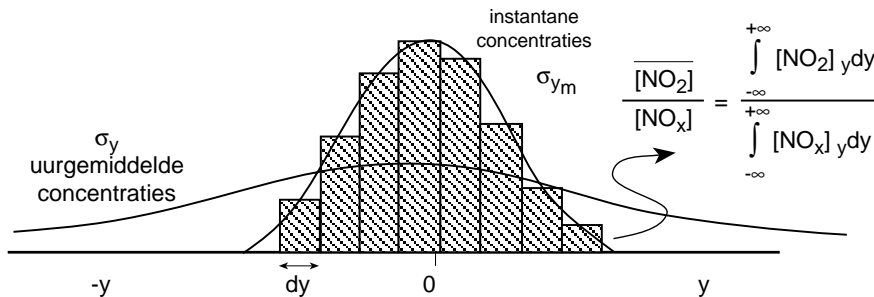
$$[NO_x]_m = f(\sigma_m) \dots \sigma_m = 1,28t^{0,82}
 \tag{111}$$

Door toepassing van dit momentaan pluimmodel en het chemisch evenwicht kan met behulp van integratie over de pluimdwarsrichting een verhouding  $NO_2/NO_x$  berekend worden. Deze fractie  $NO_2/NO_x$  is in de momentane pluim gelijk aan de  $NO_2/NO_x$  verhouding in de uurgemiddelde pluim. Uit de uurgemiddelde  $NO_2$  concentratie en dit verhoudingsgetal kan uiteindelijk de uurgemiddelde  $NO_2$  concentratie berekend worden. Figuur 8 verduidelijkt dit.

Daarbij wordt aangenomen dat de ozonconcentraties over de dikte van de menglaag constant zijn.

De momentane concentraties worden in de pluimas berekend met de windsnelheid op (uurgemiddelde) pluimashoogte en de penetratiegraad, zoals berekend in het pluimstijgingstraject. Bovendien wordt aangenomen dat de momentane pluim in verticale en horizontale richting dezelfde afmetingen heeft:  $\sigma_{my} = \sigma_{mz}$ . De waarde van  $\sigma_m$  wordt begrensd op de waarde van  $\sigma_z$  (de instantane pluimafmeting kan niet groter zijn de uurgemiddelde waarde).

Door het toepassen van de oorspronkelijke reaktiemechanismen en de beschrijving van de momentane pluim in het referentiemodel, worden er omzettingpercentages berekend die overeenkomen met die van het model KLANOMOD. Dit betekent een ondersteuning van dit (minder empirische) model. Ten opzichte van het  $NO_2$ -model, dat genoemd wordt in het Besluit Luchtkwaliteit Stikstofdioxide geven KLANOMOD en het referentiemodel (dezelfde) beduidend hogere omzettingpercentages (op wat grotere afstanden).



*Figuur 8 Op elk punt in de instantane pluim wordt de  $NO_x$  concentratie berekend door toepassing van een instantaan pluimmodel. De over deze pluim gemiddelde fractie  $NO_2/NO_x$  wordt gebruikt om de uurgemiddelde  $NO_2$  concentraties te berekenen uit uurgemiddelde  $NO_x$  concentraties.*



## Samengevat:

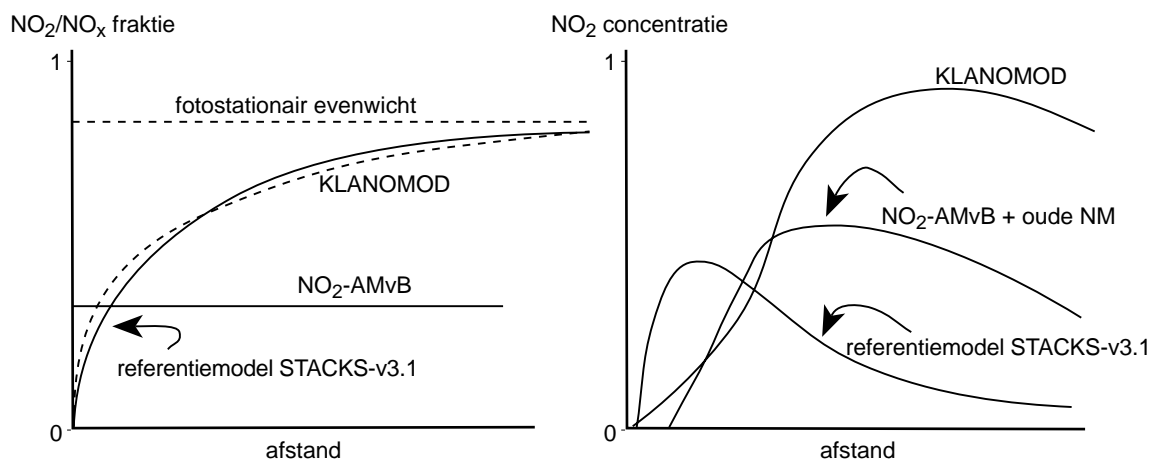
Het oude Nationaal Model omvatte geen  $\text{NO}_2$  berekeningsmethode.

KLANOMOD berekent de omzetting van  $\text{NO}$  naar  $\text{NO}_2$  'correct' maar de absolute concentraties niet (zie Figuur 9). De toepassing is beperkt tot grote bronnen; de dispersie is overeenkomstig het oude Nationaal Model.

De AMvB methode gaat uit van een constante  $\text{NO}_2/\text{NO}_x$  fractie, afgeleid uit achtergrondmetingen.

Het referentiemodel berekent de omzetting van  $\text{NO}$  naar  $\text{NO}_2$  principieel beter ( $\text{NO}_2/\text{NO}_x$  fractie; deze is afhankelijk van zoninstraling, temperatuur en instantane rookpluimconcentraties).

Ook de absolute  $\text{NO}_2$  concentraties zullen hierdoor betrouwbaarder zijn.



Figuur 9 Het referentiemodel berekent zowel dispersie als afstandsafhankelijke  $\text{NO}$ -oxidatie en verschilt hiermee van zowel KLANOMOD (goede  $\text{NO}_2/\text{NO}_x$  verhouding) als van de AMvB methode (afstandsafhankelijke  $\text{NO}_2/\text{NO}_x$  verhouding)

### 3.13 Percentielberekeningen

Doordat het referentiemodel een tijdreeks doorrekenet van duizenden afzonderlijke uurgemiddelde situaties, kunnen alle percentielwaarden eenvoudig berekend worden zonder dat aanvullende aannamen en constructies voor de combinatie met bestaande achtergrondconcentraties hoeven te worden toegevoegd. Op elk receptorpunt worden de berekende concentraties eenvoudig gesorteerd op grootte en vervolgens worden de percentielwaarden bepaald door de gesorteerde concentraties te turven. Dezelfde procedure wordt gevolgd voor andere dan 1-uurgemiddelde percentielen; voor percentielen van 24-uurs gemiddelde concentraties worden de concentraties eerst over 24 uur gemiddeld alvorens tot sorteren over te gaan.

Een tijdreeks van 5 jaar met weerssituaties is voldoende representatief om alle omstandigheden vaak genoeg terug te vinden in het bestand. Bij kortere tijdreeksen moet men zich realiseren dat bepaalde hoge percentielen niet voldoende bepaald kunnen worden. Het berekenen van het

99,9 percentiel van 24-uurs gemiddelde concentraties uit 1 jaar gegevens is natuurlijk weinig zinvol.

Bij de percentielberekening dient men er op toe te zien dat er invoergegevens als windrichting en windsnelheid worden gebruikt met een voldoende oplossend vermogen. Dit geldt in praktijk vooral voor windrichtingsgegevens: deze mogen daarom niet als discrete waarden (bijvoorbeeld gehele tientallen van graden) ingevoerd worden. In voorkomende gevallen kan men hieraan gemakkelijk voldoen door zelf spreiding aan te brengen in de invoerparameters die uit een geclassificeerd invoerbestand komen.

### 3.14 Gebouwinvloed

In deze paragraaf wordt een korte samenvatting van de gebouwmodule gegeven, een uitgebreide en gedetailleerde documentatie is gegeven in deelrapport IV.

Indien een schoorsteen of afgaskanaal zich bovenop een gebouw bevindt, kan de invloed van de stroming rond het gebouw worden verdisconteerd in de pluimparameters  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$  en de effectieve schoorsteenhoogte  $heff$ . De effecten van het gebouw kunnen zijn:

- pluimdaling aan de lijzijde
- gedeeltelijke invang in de lijwervel
- gehele invang in de lijwervel
- versterkte verticale en/of horizontale dispersie.

Voorwaarden voor de aanbevolen rekenmethode zijn dat de pijp zich op het gebouw bevindt en dat het gebouw min of meer vierkant is. Voor rechthoekige gebouwen, waarvan de verhoudingen van de dimensies zich binnen bepaalde waarden bevinden ( $lengte/breedte < 3$ ) kan in een lange termijnmodel gecorrigeerd worden. In het referentiemodel zijn de aanbevelingen opgenomen, die geformuleerd zijn in de beschrijving van KEMA (1997). Hierin zijn de correctiefactoren voor rechthoekige gebouwen opgenomen, bij verschillende aanstroomb Richtingen.

Deze aanbeveling voorziet in de volgende situaties:

- het gebouw kan hoog (torenflat-vorm), maar ook breed of smal zijn; kortom van schutting tot naald. Ook relatief lange gebouwen (in de lengte richting van de wind) zijn toegestaan.
- de pijp kan op het dak staan, maar ook voor, achter of naast het gebouw
- de uitmonding van de pijp kan lager dan het gebouw zijn
- de hoek die de wind maakt ten opzichte van het gebouw mag willekeurig ingevuld worden
- de "lijwervel" concentratie worden eveneens berekend
- concentraties op zeer korte afstand ( $< 100$  m) van een gebouw zijn hiermee te berekenen.

De module bestaat uit beschrijvende (semi-empirische) vergelijkingen die gebaseerd zijn op natuurkundige overwegingen, gefit op windtunnelmetingen van diverse oorsprong. Nieuw ten opzichte van de bestaande Nationale Methode uit 1986 (TNO, 1986) is dat in de module de stroming van de wind over een gebouw wordt beschreven met een dakwervel, een lijwervel en een stroming daaroverheen.

De lengte en hoogte van de wervels worden berekend als functie van hoogte, breedte en lengte van het gebouw en als functie van de windrichting en windsnelheid. Daarbij worden tevens de dimensies van de dakwervel berekend. De dakwervelconcentraties zelf kunnen niet berekend worden. Wel wordt aangegeven of de pluim in de wervel opgenomen wordt.

De banen van de stroomlijnen boven het gebouw worden uiteindelijk beschreven met een rekenmethode die de lijnen geleidelijk laat overgaan naar horizontale rechte stroomlijnen, rekening houdend met de hoogte van de lijn. Verder worden de impulsstijging en de pluimstijging door warmte inhoud van de rookpluim en de schoorsteen down-wash berekend en verdisconteerd. Met deze pluimstijgingen en de stroomlijnen wordt de baan van de rookpluim berekend.

Een vergelijking tussen deze nieuwe methode en de methode uit 1986 is gegeven. Ook is een indruk gegeven van de afstand waarop het effect van de gebouwinvloed nog aanzienlijk is. Uit de onderlinge afstanden tussen de pluim en de laagst-mogelijke stroomlijn worden de volgende aspecten berekend:

- de hoogte en breedte van de pluim op diverse plaatsen
- de eventuele fractie van de emissie die naar de lijwervel gaat
- de hoogte en breedte van de pluim uit de lijwervel
- de concentratie in de lijwervel (als gevolg van de opgenomen pluim-fractie en de verversing door turbulente uitwisseling met wind die over de lijwervel waait)
- de concentratie in de pluim zonder invloed van de lijwervel (rekening houdend met die eventuele pluim-fractie die in de lijwervel terecht komt).

Het blijkt dat deze benadering redelijke resultaten geeft met een nauwkeurigheid van ruwweg een factor 2 of beter, wanneer vergeleken wordt met windtunnelexperimenten.

De module geeft in een aantal gevallen twee pluimfracties terug met elk hun eigen (start)dimensies en bronsterkte. Deze betreffen de fractie in de doorgaande pluim en de fractie die in de lijwervel wordt opgenomen. De bronhoogte van deze laatste fractie is dus de wervelhoogte, zoals deze door 'GEBOUW' teruggegeven wordt. De voor de hand liggende testparameters zijn de bronsterkten; indien beide ongelijk aan nul zijn heeft men te maken met twee pluimen. De verspreiding van deze twee afzonderlijke bronstermen dienen in het hoofdprogramma voortgezet te worden. De module rekent alleen concentraties uit indien het gevraagde roosterpunt zich in de lijwervel bevindt.

De interactie van de pluim met de top van de menglaag (de inversie) levert een probleem op. In de oude aanbeveling van 1986 was de minimale menghoogte 200 m, zodat hierbij geen probleem optrad; immers gebouwen van 200 m hoogte zijn niet aan de orde. In de nieuwe aanbevelingen voor het Nationaal Model is een minimale grenslaaghoogte van 50 m opgenomen en deze waarde is zo laag dat de toppen van sommige gebouwen hierboven uit zullen steken. Er treedt dan een inconsistentie in de modellering op. De dispersieberekening houdt rekening met een gelaagde atmosfeer, waarbij de rookpluim in de stabiele bovenlaag (de transportlaag)

boven de inversie kan penetreren. Echter, de gebouwmodule veronderstelt een neutrale atmosfeer en veronderstelt dat de processen zich in de grenslaag afspelen.

Eén en ander dient zodanig in het lange-termijnmodel ingebouwd te worden, dat de volgorde van de berekeningen correct is. Doorgaans zal een computerprogramma eerst de rookpluimstijging en de penetratiegraad berekenen en daar de dispersie per receptorpunt bepalen. Bij toepassing van de gebouwmodule wordt deze module per roosterpunt aangeropen en wordt dus per roosterpunt de pluimhoogte berekend en teruggegeven aan het hoofdprogramma. Per roosterpunt moet daarom de eerder berekende pluimstijging (als effectieve pluimhoogte) gecorrigeerd worden en dient tevens de penetratiefractie aangepast worden.

De gedeeltelijke penetratie wordt natuurlijk gehandhaafd wanneer het een vrije pluim betreft (geen gebouwinvloed). Bij beïnvloeding door het gebouw wordt de pluimhoogte gecorrigeerd en wordt (alleen voor deze situatie) bepaald of als dan nog transport in de grenslaag of in de transportlaag plaatsvindt. Dit criterium bepaalt of er geen of gehele penetratie in de inversie plaatsvindt.

### 3.15 Oppervlaktebron

In de aanbeveling is een methode opgenomen die dispersie vanuit een oppervlaktebron binnen een gaussisch pluimmodel beschrijft. De methode is zodanig van opzet dat zowel dichtbij de bron als ver weg van de bron, de berekende concentraties aansluiten bij de modellering van een puntbron. In principe wordt de methode van het 'gele boek' gevolgd.

De methode voorziet in het benaderen van de oppervlaktebron door middel van een aantal lijnbronnen. Om het aantal berekeningen te beperken is ervoor gekozen om dit aantal lijnbronnen afhankelijk te laten zijn van de afstand tot de bron, met een maximum van 7 lijnbronnen.

De oppervlaktebron wordt eerst loodrecht op de windrichting geprojecteerd middels het constante oppervlak concept: eerst wordt de geprojecteerde breedte van de oppervlaktebron bepaald loodrecht op de windrichting en vervolgens wordt de geprojecteerde lengte ( $L_p$ ) bepaald door het oppervlak te delen door de geprojecteerde breedte ( $B_p$ ). De verhouding bronafstand ( $X_b$ )  $X/B_p$  bepaalt dan het aantal lijnbronnen volgens:

$$N = 7 \cdot \left( 2 \frac{X_b}{B_p} \right)^{\frac{\ln 6}{\ln 7}} \quad (112)$$

met N minimaal 1 en maximaal 7 en oneven, dus de waarden 1, 3, 5 of 7 zijn mogelijk.

Voor elke lijnbron wordt vervolgens berekend wat de afstand tot het receptorpunt is en wordt op de "normale" manier de grondconcentratie berekend, gebruik makend van de nu volgende formuleringen.

Om te bepalen of een receptorpunt zich **in** de oppervlaktebron bevindt of niet, is een routine nodig die goniometrische verhoudingen vastlegt van de oppervlaktebron ten opzichte van de windrichting. Dit is van belang omdat de concentratie binnen de oppervlaktebron een andere

berekeningswijze vraagt dan voor punten buiten de bron. Er wordt hierbij van de geprojecteerde vorm ervan uitgegaan.

Twee situaties worden apart behandeld: de concentraties binnen een oppervlaktebron en concentraties benedenwinds van een oppervlaktebron. In de aanbeveling is opgenomen een rechthoekige dan wel vierkante oppervlaktebron, waarbij de verhouding tussen langste zijde en kortste zijde niet groter mag zijn dan 2,5. Grotere verhoudingen geven onoverkomelijke problemen bij aanstromingen die niet loodrecht zijn. De concentratie binnen de oppervlaktebron (die als constant wordt aangenomen) wordt berekend met:

$$C_1 = 9/16 C_{rand}$$

met  $C_{rand}$  de concentratie die geldt voor de oppervlaktebron aan de rand van de bron (bronafstand = 0.5 effectieve lengte; de lengte is gedefinieerd als de lengte van de bron in de windrichting).

De concentratie benedenwinds van de oppervlaktebron is:

$$Q_2 = Q_1 \frac{\sigma_y \sqrt{2\pi} \cdot \left( \operatorname{erf} \left( \frac{b-y}{\sigma_y \sqrt{2}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{b+y}{\sigma_y \sqrt{2}} \right) \right)}{4b \exp \left( \frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right)}$$

Hierin is  $y$  de afstand van het receptorpunt tot een fictieve gaussische pluimas, afkomstig van een fictieve gaussische pluim in het centrum van de oppervlaktebron.  $b$  is de halve breedte (loodrecht op de windrichting),  $Q_1$  is de bronsterkte en  $Q_2$  de voor de oppervlaktebron gecorrigeerde bronsterkte op deze positie. In principe wordt gewerkt met een positie-afhankelijke brontermcorrectie  $Q_1/Q_2$ , zodat toch weer met het gaussische pluimconcept kan worden gewerkt, hoewel de pluim dan een van de gauss-kromme afwijkende vorm bezit. In feite geeft de formule aan, dat een oppervlaktebron te benaderen is als een oneindig aantal puntbronnen over de effectieve breedte van de oppervlaktebron; de erf-functie is de integrale voorstelling van deze benadering. Als benadering van deze error-functie is gekozen voor de formulering, gebaseerd op de Chebyshev fit, vermeld in Press et al. (1992); deze is voldoende nauwkeurig om over een redelijk breed scala van  $y/\sigma_y$  waarden de functiewaarden uit te rekenen (fractionele fout steeds  $< 10^{-7}$ ). Toch zullen ook hier aan de randen van de oppervlaktebron in sommige gevallen afwijkingen zichtbaar kunnen zijn (wanneer bijvoorbeeld  $y/\sigma_y > 20$  is).

Voor deze berekening moet een transportsnelheid gekozen worden en een bronhoogte. Als bronhoogte wordt een constante hoogte van 1,5 m aanbevolen. Oppervlaktebronnen worden dus als grondbronnen beschouwd met een vaste hoogte van 1,5 m. De transportsnelheid hangt samen met de hoogte boven het maaiveld van het zwaartepunt van de wolk. In analogie met de aanbeveling voor een puntbron met een geringe emissiehoogte, wordt ook hier een afstandafhankelijke hoogte van het zwaartepunt berekend. Op deze hoogte worden dan weer turbulentie en windsnelheid berekend. In principe wordt gewerkt met een positie-afhankelijke brontermcorrectie  $Q_2/Q_1$ , zodat toch weer met het gaussische pluimconcept kan worden gewerkt, hoewel de pluim dan een van de gauss-kromme afwijkende vorm bezit.

Op deze wijze is een vloeiende aansluiting met de puntbronbenadering gegarandeerd. Bij de implementatie dient men te controleren of op grotere afstanden van de oppervlaktebron dezelfde uitkomsten worden verkregen als voor een puntbron.

Een combinatie van oppervlaktebron met pluimstijging is niet mogelijk.

Evenmin kan een aanbeveling gegeven worden voor NO<sub>2</sub> berekeningen voor de emissies uit een oppervlaktebron; de methode gaat immers uit van een instantane pluim, die beschreven wordt vanuit een puntbron. De combinatie van oppervlaktebron en gebouwinvloed is evenmin in de modelformulering opgenomen.

De dimensies van de oppervlaktebron zijn aan beperkingen onderhevig. Te grote afwijkingen van de waarden 1 voor de verhouding lengte:breedte levert problemen op bij de gaussische benadering van de dispersie. Aanbevolen wordt de verhouding lengte:breedte binnen het interval 0,4 en 2,5 te houden. Bij grotere verhoudingen dient men de oppervlaktebron op te splitsen in deelbronnen.

Toepassing van het model op erg grote oppervlaktebronnen is evenmin verantwoord. Het voorliggende model is immers in principe een puntbronmodel. Als grootste minimale zijde wordt 1 km aanbevolen. Voor grotere oppervlaktebronnen worden andere modeltypes aanbevolen (bijvoorbeeld grid-modellen, waarin emissies per grid kunnen worden samengevoegd).

Natte depositie in geval van een oppervlaktebron is niet in het NNM opgenomen.

Depositie van gassen/stof bij een oppervlaktebron heeft slechts zin voor de droge depositie. Voor de natte depositie (welke wel meeberekend wordt) worden principieel verkeerde berekeningen uitgevoerd omdat de berekeningswijze uitgaat van een waarde van  $\sigma_y$  welke in het geval van een oppervlaktebron geen reële betekenis meer heeft. Er wordt aldaar immers gerekend met een broncorrectieterm, welke het breder zijn van een oppervlaktebron in vergelijking met een puntbron verdisconteert.

### 3.16 Praktische parameter-begrenzingsen

In het referentiemodel is een aantal begrenzingsen ingebouwd. Hier worden deze apart vermeld.

- De minimale grenslaaghoogte is 50 m; de maximale grenslaaghoogte is in principe onbegrensd; echter wordt op 2000 m een temperatuurgradiënt van 5 K/100 m aangenomen, waardoor de groei van de grenslaag zich ongeveer tot deze hoogte beperkt.
- De laagdikte waarvoor temperatuurgradiënten en windsnelheden worden gedefinieerd is 10 m.
- De oppervlaktelaag is op een dikte van 50 m gesteld.
- De minimale temperatuurgradiënt in een stabiele luchtlaag is 0,005 K/m
- Het windprofiel wordt berekend tot 200 m hoogte; daarboven wordt de windsnelheid constant verondersteld.
- De waarde van de bodemvochtigheidsparameter  $\alpha$  is 1.
- De waarde van de albedo is 0,2 (voor Nederland)
- De kleinste bronhoogte is 0,5 m.
- De ondergrens van windsnelheden (op 10 m hoogte), die door het model worden geaccepteerd is 0,5 m/s.

teerd is 1,0 m/s. In praktijksituaties kunnen windsnelheden van 0,5 -1,0 m/s op een windsnelheid van 1,0 worden verondersteld; de overige windsnelheden worden niet meegenomen bij de berekeningen.

- De wrijvingswindsnelheid  $u^*$  heeft een ondergrens van 0,06 m/s.
- De waarde van de Obukhov-lengte  $L$  wordt begrensd op  $-5$  indien  $-5 < L < 0$ .
- De hoogte waarvoor berekeningen kunnen worden uitgevoerd moet groter zijn dan  $z_0$  ( $z > z_0 + 0.5$ ).
- De receptorhoogte wordt op 1 m gesteld. Hiervan wordt afgeweken indien  $z_0$  groter is.
- Bij de berekening van dispersie in de oppervlaktelaag reflecteert de pluim al snel tegen de bodem. De hoogte van het pluimzwaartepunt kan dan sterk verschillen van de pluimashoogte ( $h_{\text{eff}}$ ). De transportsnelheid van de pluim en de waarden van  $\sigma_y$  en  $\sigma_z$  (dus de turbulentieparameters  $\sigma_{vs}$ ,  $\sigma_w$  en  $T_l$ ) dienen dan op zwaartepunthoogte  $z_z$  berekend te worden. Bij de invulling van de gaussische formule moet natuurlijk de pluimashoogte (voor  $z$  in formule 1) gebruikt worden.

Het zwaartepunt van de pluim kan op iteratieve wijze bepaald worden.

*Procedure:*

- Bepaal het initiële zwaartepunt van de pluim.
- Bepaal turbulentie-intensiteit en tijdschaal op zwaartepuntshoogte
- Bepaal de transportsnelheid op zwaartepuntshoogte
- Bepaal hieruit de looptijd van de pluim
- Bepaal een nieuwe waarde van sigma  $z$
- Bepaal een nieuwe waarde van het zwaartepunt
- Indien nieuwe en oude waarde van het zwaartepunt meer dan 5% afwijken, herhaal bovenstaande stappen, anders is het zwaartepunt gevonden. Bepaal tenslotte de sigma  $y$ , sigma  $z$ , transportsnelheid en looptijd van de pluim op zwaartepuntshoogte. Deze parameters worden in de gaussformule ingevuld voor de concentratie-berekening. Als effectieve pluimhoogte wordt weliswaar de hoogte van de pluimas genomen.
- Bepaling van het zwaartepunt kan op analytische wijze plaatsvinden.

Het zwaartepunt is gedefinieerd als

$$Z_p = \frac{\int z \cdot f(z) dz}{\int f(z) dz}$$

met

$$f(z) = \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

Hierin is  $z$  de hoogte,  $H$  de pluimhoogte, en sigma  $z$  de verticale dispersieparameter. De integraal loopt van  $z=0$  tot  $z=z_{\text{max}}$ .

$$z_{max} = \text{MIN}(H + 2.5\sigma_z, Z_i)$$

met  $z_i$  de menghoogte.  
De oplossing is

$$z_p = \frac{I_t}{I_n}$$

met

$$I_t = \sigma_z^2 \left[ 2 \exp\left(-\frac{H^2}{2\sigma_z^2}\right) - \exp\left(-\frac{(z_{max} - H)^2}{2\sigma_z^2}\right) - \exp\left(-\frac{(z_{max} + H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \\ + 0.5\sqrt{2\pi}H\sigma_z \left[ 2 \operatorname{erf}\left(\frac{H}{\sqrt{2}\sigma_z}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{z_{max} - H}{\sqrt{2}\sigma_z}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{z_{max} + H}{\sqrt{2}\sigma_z}\right) \right]$$

en

$$I_n = 0.5\sigma_z\sqrt{2\pi} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{z_{max} - H}{\sigma_z\sqrt{2}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{z_{max} + H}{\sigma_z\sqrt{2}}\right) \right]$$

Hierin is  $\operatorname{erf}(z)$  de error-functie van  $z$ .

- De ondergrens voor de lagrangiaanse tijdschaal-waarden ( $T_l$ ) is 1 s.
- Als absolute ondergrenswaarden voor  $\sigma_{vs}$  en  $\sigma_w$  wordt 0.01 m/s toegepast.
- De waarde van soortelijke massa van stofdeeltjes (van belang voor de depositie van stof) is 1500 kg/m<sup>3</sup>.
- De soortelijke massa van lucht 1.28 kg/m<sup>3</sup> (bij 273 K en 1013 hPa.)
- De soortelijke massa van rook  $C_{p-rook} = 1,42 \text{ kg/m}^3$  (voor pluimstijgberekeningen).
- Het getal van Prandl is 0.72
- De viscositeit van lucht is  $17.8 \cdot 10^{-6} \text{ kg/(m s)}$
- In de routine voor het berekenen van de turbulentieparameters zijn enkele begrenzings ingebouwd, die voorkómen dat er gedeeld wordt door 0. De functiewaarden nemen immers af met toenemende hoogte. Daartoe zijn onderbegrenzings bij de bepaling van de hoogteaafhankelijke waarden voor  $\sigma_v$  en  $\sigma_w$  toegepast, deze zijn: stabiele condities:

$$\sigma_{vf} > 0.05 \cdot 1.3 u.$$

$$\sigma_w > 0.05 \cdot 1.3 u.$$

neutrale condities:



$$\sigma_{vf} > 0.10 \quad 1.3 \frac{u^*{}^2}{-2fz_i} \left( e^{\frac{-2fz_i}{u^*}} - 1 \right)$$

Deze laatste formule geeft aan dat  $\sigma_v$  en  $\sigma_w$  minimaal 10% van de gemiddelde grenslaagwaarde moet hebben. Dit is gedaan om problemen aan de top van de grenslaag te voorkomen (daar zouden  $\sigma_v$  en  $\sigma_w$  anders bijna nul worden).

Voor instabiele condities kan het voorkomen dat bij de berekening van  $\sigma_w$  termen in de noemer nul worden; in deze gevallen wordt een ondergrens van 0.01 m/s gehanteerd.

- \* Voor neutrale condities ( $|L| > 1000$ ) wordt  $T_1$  in de oppervlaktelaag berekend met de limietwaarde voor de formule (40):

$$T_1 = \frac{z}{2\sigma_w}$$

- In stabiele condities wordt de Obukhov lengte naar beneden toe begrensd op een waarde van  $100 \cdot z_0$ . Dit is bedoeld om te voorkomen dat de atmosfeer in relatief ruw gebied als te stabiel wordt gekenmerkt met als gevolg een te lage waarde van de grenslaaghoogte en een onderschatting van de hoeveelheid turbulentie (vooral in steden van toepassing). Deze minimale waarde is gebaseerd op dispersieberekeningen met een Amerikaanse dataset voor stedelijk gebied (Indianapolis bestand). Na het begrenzen van de Obukhov waarde dient ook  $u^*$  herberekend te worden.

- \*\* De zwaartepuntsberekening  $z_z$  geschiedt iteratief ( $z_z$ ,  $\sigma_z$ ,  $u_p$ ,  $\sigma_w$  zijn onderling afhankelijk). Arbitrair wordt gesteld dat berekening van  $z_z$  (ipv  $h_{\text{eff}}$ ) alleen zinvol is indien  $h_{\text{eff}} < 50$  m en indien  $h_{\text{eff}} < z_i/2$  (anders wordt de zwaartepunthoogte gelijk gesteld aan  $h_{\text{eff}}$ ). De integratie vindt plaats vanaf grondniveau tot  $z + 2.5\sigma_z$  met 10 integratiestappen. De berekening eindigt indien oud en nieuw berekend zwaartepunt minder dan 5% verschillen of indien  $z > 50$  m. In het laatste geval is de oppervlaktelaag verlaten en wordt berekening van een (van  $h_{\text{eff}}$ ) afwijkend zwaartepunt niet zinvol geacht. De berekening van het zwaartepunt in de oppervlaktelaag (dus als de effectieve schoorsteenhoogte  $< 50$  m) eindigt met de restrictie dat  $z_z = 49$  indien het gevonden zwaartepunt groter is dan 49 m.

De invoergegevens voor het nieuw Nationaal Model zijn geen onderdeel van het model zelf. Echter de procedure om de invoergegevens te bewerken alvorens deze in te voeren als input in het model, bepaalt mede de eindresultaten. Daarom wordt hier aangegeven hoe de invoer moet worden gecontroleerd en bewerkt:

Meteorologische gegevens:

**De uurlijkse meteogegevens dienen te voldoen aan de volgende begrenzings:**

- Bewolking: 0.0 - 1.0
- Windsnelheid: 1.0 - 50 m/s (conversie van knopen naar m/s)
- Windrichting: 0 - 360 graden
- Temperatuur -50 - 50 °C;
- Globale straling:  $\geq 0$

Hierbij wordt aangetekend dat bij het aanmaken van het meteo-bestand de volgende conversie worden uitgevoerd.

Conversies:

- Bewolking: octa's -> fractie • 1/8
- Windsnelheid: knopen -> m/s • 0.5
- Temperatuur °Celsius -> Kelvin: + 273
- Globale straling: J/cm<sup>2</sup> -> W/m<sup>2</sup> • 100/36

Aanvulling van ontbrekende gegevens, alvorens het meteobestand te koppelen aan de rekenmodellen:

- Als de uurlijkse globale straling ontbreekt kan deze worden berekend uit de zonelevatie en bedekkingsgraad.
- Indien de windrichting ontbreekt bij lage windsnelheden (minder dan 1 m/s: variabele windrichting) wordt de laatst geldige gemeten waarde hiervoor in de plaats gezet.
- Indien de windsnelheid laag is (tussen 0 en 1 m/s) wordt de windsnelheid arbitrair op 1m/s gezet.

**Controle bij het inlezen in het Nieuw Nationaal Model:**

Parameter	Minimum	Maximum	Eenheid
Bewolking	0.0	1.0	-
Temperatuur	200	350	K
Globale straling	0	2000	W/m <sup>2</sup>
Windsnelheid	1	50	m/s
Windrichting	0	360	°

Alle andere waarden worden afgewezen en het record van de afgewezen waarden wordt niet meegenomen bij de berekeningen.

**Samenvatting Overige begrenzings:**

Parameter	Minimum	Maximum	Eenheid
Receptorhoogte	$0.5 + z_0$	49	m
Hoogte windprofiel	$z_0$	200	m
Windsnelheid op hoogte	0.5	Geen	m/s
Obukhov lengte	Stabiel: $L > 100 \cdot z_0$ Instabiel: $L < -5$	Geen	m
$u^*$	0.06	Geen	m/s
Menghoogte	50	2000	m
Tijdschaal $T_1$	1	Geen	s
$\sigma_{vs}$	0.01	Geen	m/s
$\sigma_{vl}$	0.05	Geen	m/s
$\sigma_w$	0.01	Geen	m/s
Aantal iteraties voor $L/u^*$	1	100	-
Netto straling	Geen	Geen	$W/m^2$

Indien de hoogte van de menglaag niet berekend kan worden op een bepaald uur, wordt de waarde gebruikt van het eerst voorgaande uur waarvoor de waarde wel is berekend.