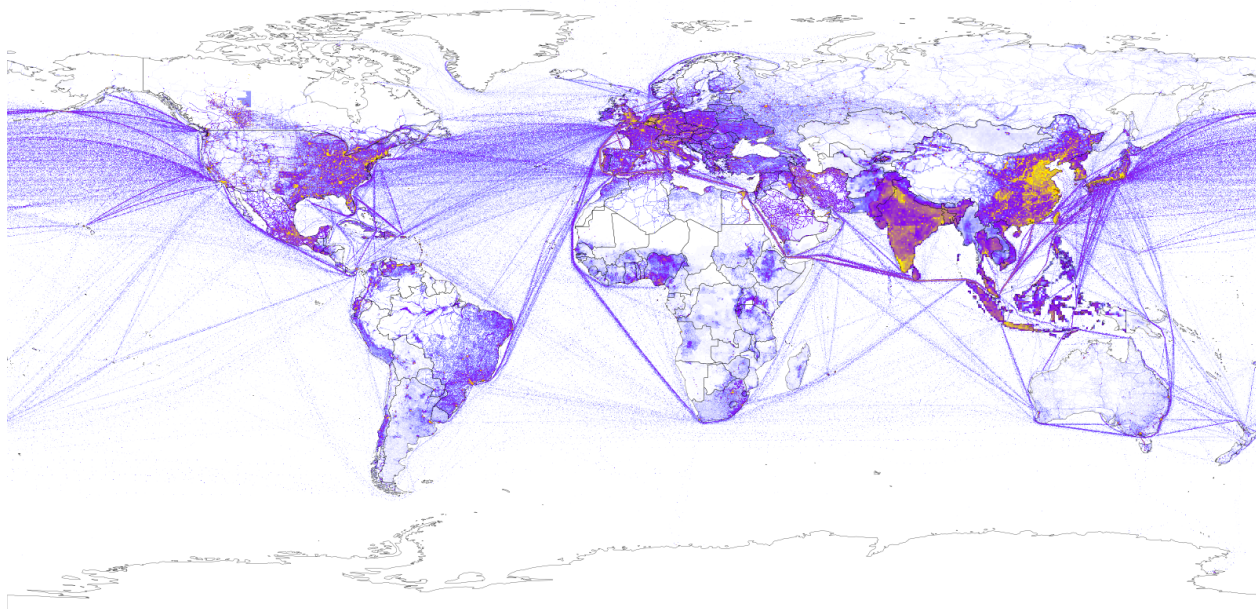




CHALMERS
UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



Utveckling av modeller för studier av luftföroreningar

Kandidatarbete RRYX02-15-01 vid institutionen för Rymd- och geovetenskap

ANTON MÅRTENSSON

EIRIK SELJELID

FRIDA ALMQVIST

KATRIN EKSTRÖM

OSKAR BOHLIN

HANDLEDARE: DAVID SIMPSON

Institutionen för Rymd- och geovetenskap
CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
GÖTEBORG, SVERIGE JUNE 2, 2015

Sammanfattning

Den accelererande befolkningsökningen i kombination med att allt större del av världen söker högre levnadsstandard leder till ökade utsläpp av miljöfarliga gaser som exempelvis kväveoxider, fotokemiska oxidanter och flyktiga organiska ämnen. Luftföroreningsmodeller är ett viktigt verktyg i arbetet att kartlägga effekterna av denna utveckling samt se hur luftföroreningar sprids från källan.

Det här kandidatarbetet ämnar att med hjälp av en endimensionell och stillastående luftföroreningsmodell, ESX-modellen, skapa en komplett luftföroreningsmodell. Denna modell ska följa en luftbana, så kallad trajektoria, för att längs denna samla in data gällande meteorologi och kemiska utsläpp.

Atmosfären kan delas in i olika gränsskikt där blandningslagret är det mest intressanta för studier av luftföroreningar. Blandningslagret karakteriseras av stark turbulens vilket ger en hög omstättning av utsläpp. För att vara verklighetstrogen behöver därför en luftföroreningsmodell ta hänsyn till ekvationer som rör detta lager och dess höjd, blandningshöjden.

Arbetet har resulterat i ökad kunskap inom atmosfärskemi och meteorologi men även i två separata luftföroreningsmodeller med ESX-modellen som bas. Modellerna är utvecklade och körbara i en Linuxmiljö. Den principiella skillnaden är att den ena utnyttjar tredjepartsprogrammet HYSPLIT för generering av trajektorior, medan den andra genererar dessa själv med hjälp av meteorologisk data. Modellernas funktionalitet har inte fullständigt kunnat verifieras beroende på problem i ESX-modellen, men utgör båda fungerande system för generering av trajektorior och förser ESX-modellen med nödvändig indata.

Nyckelord: Trajektoria, luftföroreningsmodell, python, HYSPLIT, luftföroreningar, meteorologi, atmosfärskemi

Abstract

The growing population combined with an overall higher standard of living results in higher emissions of nitrogen oxides, photochemical oxidants and volatile organic compounds. Air pollution models are important tools in surveying the effects of this development and understanding how emissions spread from their point of origin.

The purpose of this project is to create a complete air pollution model, given a stationary one dimensional air parcel model, the ESX model. The model will follow the flight path of an air parcel, a trajectory, along which it will collect data concerning meteorology and toxic release.

The atmosphere can be divided into different boundary layers where the mixing layer is the most interesting for air pollution studies. The mixing layer is characterized by high turbulence which gives a significant mixing of emissions. An airpollution model therefore has to consider equations concerning this layer and its height, the mixing height.

The project has resulted in a greater understanding of atmospheric chemistry and meteorology, but also two separate air pollution models based on the ESX model, *HY-ESX* and *EStraX*. The models are developed and executable in a Linux environment. The main difference between the two models is in how they compute the trajectories, one uses third-party application HYSPLIT and the other calculates them directly from meteorological data supplied by ECMWF. Evaluation of the models precision hasnt been fully concluded due to problems with the ESX model, but both serve as systems that provide the ESX model with necessary data through trajectory generation.

Keywords: Trajectory, air pollution model, python, HYSPLIT, air pollution, meteorology, atmospheric chemistry

Innehåll

1	Inledning	1
2	Syfte	2
3	Avgränsningar	2
4	Meteorologi	2
4.1	Gränsskikt	2
4.1.1	Turbulens	3
4.1.2	De tre största gränsskikten	4
4.2	Potentiell temperatur	5
4.3	Kemisk deposition	6
4.3.1	Torrdeposition	6
5	Trajektorior	8
5.1	HYSPLIT	8
5.2	EStraX	10
6	Kemi	10
6.1	Kväve	10
6.2	Ozon och fotokemiska oxidanter	10
7	Luftföroreningsmodeller	12
7.1	EMEP	13
7.2	ACDEP	14
7.3	ESX-modellen	15
8	Metod	16
8.1	Arbetsgång	16
8.2	Programvara	17
8.2.1	Operativsystem	17
8.2.2	Python	17
8.2.3	Databehandling	18
8.2.4	Programmeringstekniskt	18
8.3	Grundläggande funktionalitet hos modellerna HY-ESX och EStraX	19
8.3.1	HY-ESX	19
8.3.2	EStraX	19

8.4	Genererade trajektorior	20
8.4.1	HYSPLIT	20
8.4.2	EStraX	21
8.5	Meteorologiska data	22
8.6	Utsläppsdata	22
9	Resultat	23
9.1	Genererade trajektorior	23
9.1.1	Koncentrationer beräknade med ESX	25
10	Diskussion och slutsats	29
10.1	Trajektoriamodeller	29
10.1.1	HY-ESX	29
10.1.2	EStraX	29
10.2	ESX-modellen	30
10.3	Genererade trajektorior	30
10.4	Beräknade koncentrationer	31
10.5	Medelvärdering	31
10.6	Osäkerhet i meteorologisk data	31
A	Användarmanual	36
A.1	Introduktion	36
A.2	HY-ESX	36
A.3	EStraX	37

1 Inledning

Under det senaste århundradet har det skett en drastisk ökning av utsläpp av miljöförstörande ämnen. Exempel på dessa är kväveoxider, flyktiga organiska ämnen och fotokemiska oxidanter. Förklaringen ligger delvis i den ökade industrialiseringen som försöker hålla jämn takt med behovet från en globalt sett accelererande ökning av befolkning och genomsnittlig levnadsstandard.

Tidigare ansågs luftföroreningar endast vara ett lokalt problem men numera finns det även tydliga bevis för dess globala påverkan [1]. Luftföroreningarnas effekter har också insetts ha en betydande påverkan även i mindre städer och inte bara i städer med mycket luftföroreningar [2].

De dominerande luftföroreningarnas påverkan har upptäckts de senaste årtiondena, vilket har gjort att processen att reglera utsläpp har nått stora framsteg i större delen av världen. Effekterna av en del luftföroreningar, exempelvis ozon, har dock en längre tidsförskjutning. Som följd av att mer sofistikerade metoder därför krävs för att detektera deras påverkan har regleringarna av dem inte fått samma genomslag [1].

Hälsopåverkan till följd av luftföroreningar kan delas in i två delar; direkt påverkan på grund av gaser och partiklar samt hälsoeffekter som har sin grund i hur den omgivande miljön påverkats av luftföroreningar. Den direkta inverkan från partiklar som sot och marknära ozon påverkar människor genom hjärt- och kärlsjukdomar [3], respektive irriterade slemhinnor och lungor [4]. Indirekt påverkan fås genom att luftföroreningar påverkar växt- eller djurliv, som i sin tur kan påverka människan. Ett tydligt exempel på detta är luftföroreningars bidrag till ökad växthuseffekt.

För att hantera och förhindra ytterligare negativa effekter på miljön behövs en kartläggning av vilka ämnen som finns i luften och hur de förflyttas. Det är även intressant att undersöka var utsläppen kommer från och vart de hamnar, då det inte nödvändigtvis är så att de uppmätta koncentrationerna i en specifik region har sitt ursprung där. Kartläggning över ämnen och deras förflyttning kan genomföras med hjälp av så kallade luftföroreningsmodeller, vilka försöker efterlikna luftens beteende i atmosfären. Dessa modellerar luftmassors rörelser som i sin tur ger indikationer på var specifika ämnen kommer ifrån, vart de är på väg samt hur stora koncentrationer det rör sig om. Som utgångspunkt för projektet fanns en endimensionell, stationär modell, Eclair Ecosystem Surface Exchange Model (ESX-modellen), för kartläggning av utsläpp, dispersion och kemisk transformation över ett visst luftrum. Modellen kräver dock indata i form av meteorologisk data och utsläppsdata med vilken den beräknar gas och partikelkoncentrationer vid önskade koordinater och tidpunkter.

Huvudsakligen har två luftföroreningsmodeller utvecklats, *HY-ESX* och *EStrax*, som använder sig av ESX-modellen för beräkningar av koncentrationer, genererar trajektorier samt hanterar data. En stor del av arbetet har ägnats åt programmering, och då huvudsakligen i programmeringsspråket *Python*, vari program har skrivits för att både generera trajektorier (*EStrax*) och behandla data. Dessutom, för att förstå och kunna bygga upp luftföroreningsmodeller, har teori bakom meteorologi och atmosfärskemi också varit en stor del i projektet.

2 Syfte

Detta kandidatarbete syftade till att med en endimensionell, stationär luftföroreningsmodell som bas skapa en fullständig luftföroreningsmodell som kan följa luftbanor, så kallade trajektorior, över längre sträckor. Projektet hade till uppgift undersöka olika trajektoriamodeller vars data skulle användas tillsammans med ESX-modellen för att möjliggöra observationer över tid. För att förstå grundläggande modell, med den skapa ett mer dynamiskt angreppssätt samt analysera resultatet har även projektet syftat till att ge medlemmarna en djupare förståelse för meteorologi och atmosfärkemi.

Efter arbetets slut skulle en väldokumenterad infrastruktur av Python-moduler med öppen källkod finnas tillgänglig för användning och vidareutveckling. Det här för att öka tillgängligheten till modeller som påverkar flera vetenskapliga fält samt att skapa möjligheten att bygga vidare på den med nya relevanta funktioner.

3 Avgränsningar

Då syftet med projektet var att med hjälp av ESX-modellen utveckla en komplett luftföroreningsmodell har inte heller någon vidare utveckling av ESX-modellen gjorts. Utan fokus har legat på att utveckla en trajektoriamodell genererad från HYSPLIT samt att förse ESX-modellen med utsläpps- och meteorologisk data.

En större förståelse för atmosfärisk kemi och meteorologi låg också till grunden för projektet. Här har fokus legat på korrelationen mellan kväveoxider och ozon med inslag av flyktiga organiska ämnen. En djupare studie av övriga växthusgaser och miljöfarliga ämnen har inte gjorts. Detta för att hålla samma fokus som modellen. För meteorologin har en inriktning på gränsskikt, dess uppkomst och påverkan samt våt- och torrdeposition gjorts. Övriga meteorologiska fenomen kräver egna studier då modellens fokus även här legat till grund för avgränsningen.

Hela projektet, både befintlig modell och vidareutveckling av denna, är och skall förbli ”open source”. På grund av att den befintliga ESX-modellen, samt övriga välanvända verktyg och modeller, främst är utvecklade mot Linux-system är även detta projekt riktat främst mot dessa. Programmen går att köra i Windows med lite mer arbete, men att utöka till full Windows-kompatibilitet var inte en del av projektet.

4 Meteorologi

4.1 Gränsskikt

Det luftrum som ligger mellan marken och 100 – 3000 m kallas jordens gränsskikt, vars höjd varierar med tryck- och dygnsvariationer. Resterande luft ovanför detta kallas den fria atmosfären. Gränsskiktet definieras som det lager av troposfären som direkt påverkas av jordens yta och svarar på ytkrafter med en tidsskala på cirka en timme. Anledningen till att man definierar tidsskalan till ca en timme är att ändringar i gränsskiktet har börjat men

de har inte nått den fria atmosfären. Ett jämviktstillstånd behöver dock inte infunnit sig i gränsskiktet [5].

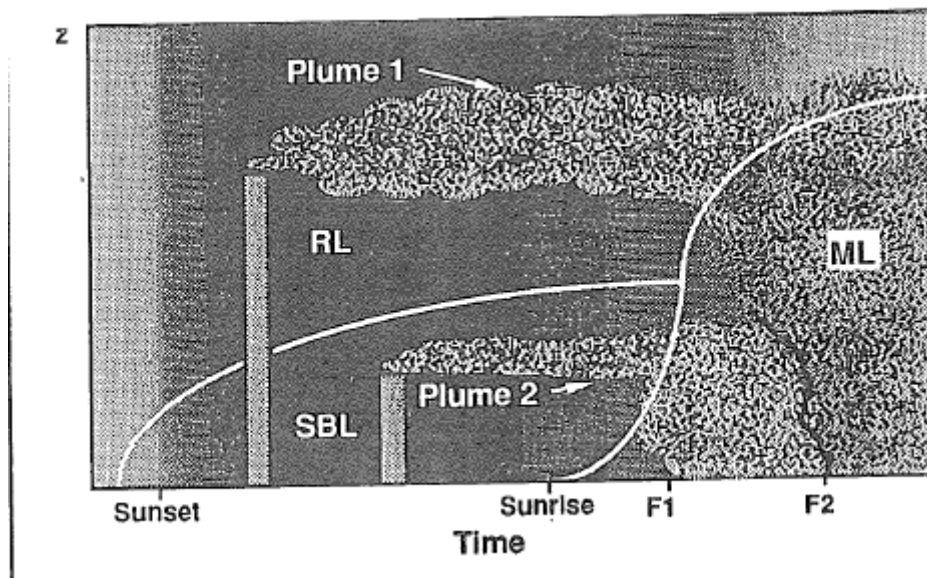
För områden med höga tryck är gränsskiktet högre över både land och hav. Dessa tjocka lager innehåller oftast inga moln. I områden med låga tryck finns uppåtströmmar som transporterar gränsskiktluft bort från marknivån upp mot troposfären, vilket gör det svårare att definiera gränsskiktet. I högtrycksområden över land kan gränsskiktet definieras tydligare och delas in i olika lager. De tre största skikten är blandningslagret, resterande lagret och det stabila gränsskiktet. Om det finns moln ligger de i blandningslagret och det kan då vidare delas in i molnlagret och under molnlagret. Skiktet precis vid marknivån kallas för ytlagret, vilket är de lägsta 10 procenten av hela gränsskiktet oavsett vilket annat lager som kan ingå. Det är i ytlagret som det finns stora variationer i turbulens. Den absolut lägsta luftmassan mot jorden kallas för microlagret. Det är endast några centimeter djupt, ibland även millimetertunt, och det är här all transport mellan luft och vegetation sker. Detta innebär alltså att den molekylära transporten är större än den turbulenta [5].

4.1.1 Turbulens

Turbulens är en viktig mekanism som kan påverka definitionen av gränsskiktet. Vind som förs in i gränsskiktet kan delas upp tre kategorier: medelvind, vågor och turbulens. Horisontell transport, eller advektion, bildas mestadels från medelvind. Vertikal medelvind är mycket långsammare och påverkar således inte lika mycket. Under natten är vågor den avgörande kategorin vind, emellertid inte i Göteborg där det blåser mycket. Vågor transporterar inte speciellt mycket luftföroreningar, men är desto viktigare för mer energi- och impulstransport. Den tredje kategorin av vind, turbulens, är karakteristisk för gränsskiktet. I den fria atmosfären finns turbulens endast i vissa moln och nära starka vindstömmar. För att undersöka vinden kan variabler som temperatur delas in i en medel del där medelvindens påverkan syns, och en störningsdel där vågor- och turbulenspåverkan kan studeras [5].

Majoriteten av turbulensen i gränsskiktet bildas antingen från vindfält eller från att jordytans temperatur ändras av solen. De oregelbundna luftvirvlar som definierar turbulensen kallas för *eddies*. Anledningen till att turbulens är en så viktig faktor är att luftföroreningar transporteras mycket effektivare med turbulens än med diffusion. Temperaturen i en *eddy* kan variera vilket försvårar mätningen, istället används ett uttryck för Taylors hypotes för temperatur i en dimension för att kunna mäta upp hur turbulent gränsskiktet faktiskt är [5].

En av mekanismerna bakom bildandet av turbulens är flytkraften. Då luft blir varmare stiger den uppåt då den har lägre densitet än den kallare luften. Den egentliga temperaturen för omättad fuktig luft är alltid högre än för den absoluta lufttemperaturen. Detta på grund av att vattenånga har lägre densitet än torr luft och att fuktig omättad luft har högre flytkraft än torr luft vid samma temperatur. Då vatten har högre temperatur än luft är molnig luft tyngre än molnfri luft [5].



Figur 1: Beskriver hur blandningslagret, ML, det resterande lagret, RL och det stabila gränsskiktet, SBL, förändras över dygnet. Z är höjden över marken [5].

4.1.2 De tre största gränsskikten

I blandningslagret uppstår turbulens genom att varm luft från marken stiger uppåt samtidigt som kall luft från moln sjunker vilket bidrar till konvektion. Under molnfria dagar växer blandningslagret endast genom att den varma luften från marken stiger vilket resulterar i ännu kraftigare blandning. I det här lagret blandas utsläpp fritt i luften vilket inte bara ökar den resulterande ytan för var de “landar” utan även reaktionshastigheten då de lättare “träffar på” reaktanter att reagera med. Ett mindre blandningslager kan dock orsaka onormala höjningar av vissa utsläpp vilket kan påverka det lokala området avsevärt. Blandningslagrets topp fungerar som ett lock på en kokande gryta och fungerar genom att spärra in den turbulenta luftmassan. De andra lagren kan också fungera som väggar mot blandningslagret vilket kan isolera utsläppen till den turbulenta luftmassan [5].

Namnet “det resterande lagret” syftar på den luftmassa som blir kvar när solen går ner och turbulensen sjunker i blandningslagret och då den varma luften inte längre stiger från marken. Koncentrationen och övriga variabler i det resterande lagret varierar då de är initialt samma som för blandningslagret under dagen innan. Utsläppsgaser färdas genom det resterande lagret och bildar plymlänkande former. Detta på grund av att turbulens inte påverkar lika starkt här och leder till att gaserna inte blandas upp på samma sätt. Precis innan det resterande lagret återigen omvandlas till ett blandningslager under morgonen hinner ibland solstrålar utlösa reaktioner bland utsläpp. Då turbulensen är låg tar sig utsläpp i det resterande lagret sig inte ned till marken utan kan färdas långa sträckor från utsläppskällan. Toppen av utsläppskonen kan ibland nå det neutrala gränsskiktet ovan, detta kallas “lyftning” [5].

Under det resterande gränsskiktet finns på natten det stabila gränsskiktet, som karakteriseras av statisk, stabil luft med små inslag av turbulens. Den stabila luften dämpar bildandet av turbulens samtidigt som den bildar luftströmmar som i sin tur förstärker turbulensen. Re-

sultatet blir korta inslag av turbulens som bildar blandning i lagret. Blandningslagrets topp har en tydlig definition. För det stabila lagret finns inte samma definitiva gräns utan det blandas ihop med det resterande lagret. Utsläpp i det stabila lagret rör sig likt i det resterande lagret horisontellt. De har dock inte samma plymform utan breder ut sig mer platt. Det stabila lagret kan även bildas under dagen om marken är kallare än luften [5].

Då solen återigen stiger och det resterande lagret och det stabila lagret övergår i blandningslagret blandas utsläppsgaserna runt och når ner till marken. Lagrens utveckling under ett dygn illustreras i figur 1.

4.2 Potentiell temperatur

Då turbulens uppkommer bland annat från att varm luft stiger över kall och då påverkar blandningshöjden, är temperatur en viktig variabel för modellen. Den så kallade potentiella temperaturen θ definieras enligt ekvation (1), där P är lufttrycket och P_o är referenstrycket, vanligtvis 100 kPa.

$$\theta = T \left(\frac{P_o}{P} \right)^{0,286} \quad (1)$$

Genom att ta bort förändringar i tryck för ett luftpaket kan den egentliga potentiella temperaturen tas fram. För mättad luft definieras den egentliga potentiella temperaturen, θ_v enligt

$$\theta_v = \theta(1 + 0,61r_{sat} - r_L), \quad (2)$$

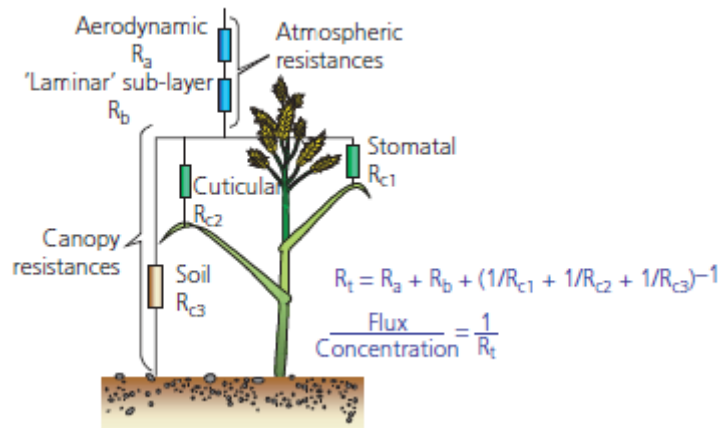
där r_{sat} är den mättade vattenångans blandnings ratio med luft och r_L är vattnets blandnings ratio, [g/g]. För omättad luft beskrivs den egentliga potentiella temperaturen som ekvation (3) där r är blandningsration.

$$\theta_v = \theta(1 + 0,61r) \quad (3)$$

Till första ordningen kan den potentiella temperaturen bestämmas enligt ekvation (4), där z är höjden över 100 kPa nivån (och ibland höjden över marknivån), g gravitationskonstanten och C_p den specifika värmekonstanten.

$$\theta \cong T + \left(\frac{g}{C_p} \right) z \quad (4)$$

Skillnaden mellan den egentliga potentiella temperaturen och den potentiella temperaturen kan ses om liten, men är ej försumbar [5].



Figur 2: Illustration av hur torrdeposition till biosfären sker [7].

4.3 Kemisk deposition

Transport av materia från atmosfären till jordytan kallas deposition. Depositionen är beroende av atmosfäriska parametrar som turbulensintensitet, vindhastighet, egenskaper i terrängen och kemisk reaktionsförmåga. Även ämnens kemiska och fysiska egenskaper som partikelstorlek och löslighet är faktorer som påverkar [6]. Depositionen delas ofta in i två kategorier; våt- respektive torrdeposition. Även om torr- och våtdeposition logiskt nog borde bidra jämförbart mycket i transporten av ämnen från atmosfären till jordens yta är torrdeposition den som är svårast att mäta och därför finns det mindre kunskap om hur den påverkar [6]. Eftersom den depositionen är svår att mäta, på grund av antalet påverkande faktorer, är det också den som vi har ett behov av att modellera för att få fram verklighetstroget data.

Våtdeposition¹ är den deposition av ämnen från atmosfären som kommer till jordytan med nederbörd. Ett exempel på hur våtdeposition kan ske är via surt regn² där svavel och kväveoxider bildar syror vid reaktion med vatten i moln.

4.3.1 Torrdeposition

Torrdeposition³ är tvärt emot våtdeposition utfällningen av gaser och partiklar till biosfären som inte förekommer till följd av nederbörd.

För att förenkla transportprocessen från atmosfären till vegetation och vatten brukar höjden av luftlagret som behandlas att delas upp i resistanslager, se figur 2. Varje lager har en resistans som beskriver den vertikala överföringen av luftburna ämnen [8]. Lagren och tillhörande resistanser är den aerodynamiska resistansen R_a , det laminära gränsskiktets resistans

¹<http://www.oxfordreference.com/view/10.1093/acref/9780199641666.001.0001/acref-9780199641666-e-8903>

²<http://www.oxfordreference.com/view/10.1093/acref/9780199641666.001.0001/acref-9780199641666-e-51>

³<http://www.oxfordreference.com/view/10.1093/acref/9780198609957.001.0001/acref-9780198609957-e-2246>

R_b , och ytresistansen R_c . För partiklar behandlas inte det sistnämnda lagret på grund av att storleken på partiklarna gör att de inte kan reagera med växtligheten på samma sätt. Den så kallade resistansmetoden används för att få ut depositionshastigheten V_d och beskrivs med ekvation (5) [9, 8]. Anledningen till att man valt att använda resistans istället för att direkt räkna på hastigheten av transportförhållandet är att resistansen är additiv och därmed enklare att räkna på [10].

$$V_d = \frac{1}{R_a + R_s + R_g} \quad (5)$$

Resistansen R_a beror av vindhastighet, stabilitet och friktionshastigheten på grund av ojämnheter i ytan [9]. Primärt är R_a en funktion av turbulensen skapad av eddies och den turbulenta masstransporten brukar jämföras med den för värme men även rörelsemängd skulle kunna användas. Den här likställningen mellan värme- och masstransport är vetenskapligt accepterad, men det finns inga bevis på att det angreppssättet är det bästa. Man har däremot visat på stark korrelation mellan dem och turbulent transport av värme är välkänt från observationer på mikrometeorologisk skala. Hur viktig den aerodynamiska resistansen är jämfört med de andra beror på vilken höjd man väljer att göra sina beräkningar på [11].

Resistansen R_s hos det läminära gränsskiktet behandlar transport över mikrolagret som är i kontakt med ytelementen. Eftersom luftens blandningsmöjligheter minskar nära ytskikt kommer gasens egenskaper, i synnerhet dess difusionsegenskaper att karaktärisera resistansen.

Resistansen R_g i ytskiktet är minst känd och beskriver den process då ämnen från atmosfären blir infångade och bibehållna av vegetationen. R_g är därför mest beroende av gasens egenskaper [8].

Ytans ojämnheter beskrivs på olika sätt beroende på vilken landtyp som i det ögonblicket beskriver systemet. För hav tas hänsyn till det ömsesidiga beroendet av ytans ojämnheter och friktionshastighet, men även till lösligheten och reaktiviteten hos ämnen i vattnet. Hastigheten för utfällning av ämnen från luftpaketet till hav är för de flesta ämnen mycket lägre än för land vilket ger en viktig skillnad för en studies resultat [9].

Depositionshastigheten beror inte bara på underliggande terräng, utan även på dygnets variationer. Dagtid har vegetationen öppet sina så kallade klyvöppningar, som ökar upptaget av luftburna ämnen. Även faktumet att blandningslagret minskar i höjd under natten och därför ökar koncentrationen påverkar.

Flödet F av torrdeposition till ytan, vilket är den faktor som används i luftförrovningsmodeller, kan beskrivas med (6) där C är den luftburna ämneskoncentrationen [10].

$$F = \frac{C}{R_a + R_s + R_g} = C \cdot V_d \quad (6)$$

5 Trajektorior

De banor luftpaketet följer kallas *trajektorior*, vilka i det här sammanhanget kan beräknas på olika sätt genom olika modeller. Ett exempel kan vara att undersöka verkligt atmosfäriskt beteende och försöka återskapa det med uppmätt meteorologisk data, som interpoleras i enlighet med ett specifikt koordinatsystem. Vidare ger då detta möjligheten att erhålla beräknade data för koordinater där det inte finns tillgång till mätstationer.

Det finns två huvudkategorier som denna typ av trajektoriamodeller delas in i: Eulerska och Lagrangeska modeller. Båda fungerar bra vad gäller omblandning och spridning i atmosfären [12], och bygger på integrationsmetoder så som exempelvis trapets⁴-, Euler⁵- eller RK4-metoden⁶. Den Eulerska modellen baseras på beräkning av ett advektions- och spridningssamband med fast rutnät, medan fristående beräkningar för advektion och spridning görs för de Lagrangeska modellerna. Huvudsakligen är det önskvärt att använda Eulerska modeller då lösningar för samtliga av rutnätets punkter behövs, som vid exempelvis analys av mer komplicerade utsläppsscenarior. Vid utsläppsscenarior vid färre rutnätspunkter föredras istället Lagrangeska modeller [13], som generellt har lägre numerisk spridning vilket gör dem mer verklighetstrogn [14]. Dessutom gör sig Lagrangeska modeller bra för beräkningar av system där snabba förändringar sker, som i till exempel gasers flöden i atmosfären [15].

Några vanligt förekommande trajektoriamodeller är *HYSPLIT* och *FLEXTRA*⁷, vilka båda är Lagrangeska modeller. I projektet har dock endast HYSPLIT använts tillsammans med en egengenererad modell, som är en del av EStrax, för att skapa trajektorior. För övrigt finns det två olika tillvägagångssätt som används vid Lagrangesk modellering av luftföroreningar, en källorienterad och en mottagningsorienterad. I det här projektet har det sistnämnda använts, eftersom man är intresserad av koncentrationer i ett fixt område så som en stad eller en specifik mätstation [9]. Mottagningsorienterad innebär att man utgår från en specifik punkt, så som Göteborg, och sedan bakåtintegrerar så att startpunkten istället blir slutpunkten. Dessa trajektorior kallas för bakåttrajektorior, vilka vi uteslutande använder oss av i projektet.

5.1 HYSPLIT

Huvudsakligen utvecklades HYSPLIT-modellen under 80- och 90-talet, där version 4 är den senaste och också den som används i det här projektet [13]. HYSPLIT-modellen (HYbrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model) är en modell för att kunna beräkna trajektorior med hjälp av meteorologisk data, dock kan den även användas för mer komplicerade simuleringar av gasers deposition och dispersion. Dessutom är den en hybrid mellan en Eulersk och Lagrangesk modell, där de Eulerska egenskaperna används för att beräkna partikel- och gaskoncentrationer i luften.

Gränsskikten för modellen är uppdelade så att skiktens tjocklek ökar med ökat lagerindex,

⁴<http://sv.wikipedia.org/wiki/Trapetsmetoden>

⁵http://sv.wikipedia.org/wiki/Eulers_stegmetod

⁶<http://sv.wikipedia.org/wiki/Runge-Kuttametoden>

⁷<http://flexpart.eu/wiki/FtAbout>

k, vilket innebär att vederbörandes starthöjd, z , från grundnivån ges enligt

$$z = ak^2 + bk + c, \quad (7)$$

där a , b och c är lika med 30, -25 respektive 5. Detta ger alltså att modellen har högre upplösning i skikten närmare marknivån och lägre i skikten längre upp, vilket spelar roll för vad exempelvis tryck och densitet kommer vara i de olika skikten. Konstanterna går att ändra för att ändra upplösningen på modellen. Modellens upplösning får dock inte vara lägre än upplösningen för given indata. Modellen använder sig dessutom av ett σ -koordinatsystem enligt

$$\sigma = \frac{Z_{top} - Z_{msl}}{Z_{top} - Z_{gl}}, \quad (8)$$

där Z_{top} , Z_{msl} respektive Z_{gl} är toppen på koordinatsystemet, havsytans medelnivå respektive marknivån. Den meteorologiska datan interpoleras så att den följer detta koordinatsystem, och beroende på vilken typ av data, samt parametrar, som ska inkluderas behövs olika typer av vertikala koordinatsystem; Pressure-Absolute, Pressure-Sigma, Terrain-Sigma och Hybrid Absolute Pressure Sigma. HYSPLIT-modellen är alltså relativt flexibel med tanke på att den klarar att ta in meteorologiska data baserade på ett flertal olika vertikala koordinatsystem.

För att vidare kunna generera trajektorier behövs även advektion tas hänsyn till. Beräkningar av advektionens påverkan på partiklarna genomförs med hjälp av trapetsmetoden, som gör en första gissning P' till advektionen baserat på hastigheten V enligt ekvation (9). Följaktligen erhålls en slutposition P enligt (10) [15].

$$P'(t + \Delta t) = P(t) + V(P,t)\Delta t \quad (9)$$

$$P(t + \Delta t) = P(t) + 0.5[V(P,t) + V(P',t + \Delta t)]\Delta t \quad (10)$$

Meteorologisk data i form av hastighetskomponenter, vilka ger hastighetsvektorn V , erhålls från exempelvis European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF), ett forskningsinstitut som producerar och tillhandahåller väderdata [16].

För att erhålla partikelkoncentrationen längs trajektorierna direkt från HYSPLIT behövs ytterligare beräkningar tas i beaktande. I det här arbetet är det dock endast den meteorologiska datan längs koordinaterna för trajektorierna som är av intresse, eftersom gaskoncentrationerna beräknas med ESX-modellen. Därför beskrivs inte hur detta skulle kunna göras med HYSPLIT ytterligare.

5.2 EStrax

För detta projekt har en samling moduler vi valt att kalla EStrax skrivits i Python. Denna kod är gjord för att vara mycket flexibel men i detta projekt har vi främst läst in ECMWF data och integrerat denna med trapetsmetoden likt hur HYSPLIT har använts.

6 Kemi

För att ge läsaren grundläggande förståelse kring den kemi som tas hänsyn till i ESX-modellen finns nedanstående de nedanstående avsnitten 6.1 och 6.2. Då ESX-modellens huvudsakliga fokus ligger på korrelationen mellan kväveoxider och ozonkoncentrationer är det främst kemiska reaktioner som rör dessa delar som behandlas.

6.1 Kväve

Kväveföreningar kan till skillnad från svavelföreningar upptas av träd. Detta ger dock inte en fullständig bild av hur den totala upptagningen för träd ser ut. Kväve i atmosfären delas in i två huvudgrupper, reducerat kväve och oxiderat kväve. Blöt och torr deponering av oxiderat kväve är det som dominerar i Skandinavien. Blöt deponering av reducerat kväve står dock för ca 20% – 30% av den totala deponeringen för skog. Deponeringen av kväve till havet är en viktig faktor och man har kunnat visa att ca en fjärdedel av det ingående kvävet i Östersjön kommer från luften [17].

Kväveoxider kan oxideras av ozon (se avsnitt 6.2). Det är därför man kan se en sänka i ozonkoncentrationen inne i staden där kväveoxider släpps ut. När dessa sedan lämnar staden bildar de ozon och koncentrationen höjs igen. Det är främst i industrialiserade områden man tydligt kan se dessa trender i både NO_x och O_3 koncentrationer [18].

6.2 Ozon och fotokemiska oxidanter

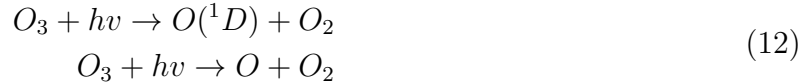
Ozon är idag ett ämne som det talas mycket om i diskussioner kring växthuseffekter och miljöskadliga ämnen, men ozon finns faktiskt naturligt i stratosfären. Det är ozonet i stratosfären som gynnar oss genom att blockera kortvägig UV-strålning. Utsläpp av exempelvis halogener gör hål i detta ozonskydd vilket resulterar i förhöjd medeltemperatur på jorden och de miljöfarliga följderna detta för med sig [19]. I troposfären finns det även naturligt ozon som kommer antingen från stratosfären eller bildas av kväveoxider och flyktiga organiska ämnen. Det är när koncentrationen av detta ozon ökar, från de naturliga värdena, som ämnet går från att vara ett miljöskydd till en miljöbov. I artikeln A Mounting Menace [19] skriver författarna om hur Haagen-Smit visade på 1950-talet att ozon kan även bildas genom bestrålning av avgaser från förbränningsmotorer. På 1970-talet visade forskning på att fotokemiska processer är en av huvudanledningarna till bildandet av svaveldioxid och det är främst här som episoder av fotokemiska luftföroreningar börjar rapporteras. I Sverige mättes den första förhöjda ozonkoncentrationen i mars 1972 [19] och dess ursprung spårades till centrala Europa. Forskarna insåg att luftföroreningar färdas långa vägar och metoder för att

spåra utsläppens bana blev högst intressant [20]. Alstringen av en förhöjd ozonkoncentration i troposfären är skadlig för inte bara mark och skörd utan även material och människors hälsa [21, 22].

Ozon bildas enligt ekvation (11) där M är en tredje part som tar upp den överblivna energin från reaktionen.



Ozon förstörs huvudsakligen av fotolys av O_3 enligt ekvation (12).



Det mesta av atmosfäriskt syre, O , bildas genom fotolys av kvävedioxid (13) vid en våglängd under 440 nm.



Kväveoxider reagerar sedan med ozon och bildar kvävedioxid och syrgas (14). En alternativ reaktion är att kvävetrioxid och ozon bildar kvävedioxid och syrgas enligt ekvation (15).



Ozon kan även förstöras av hydroxidradikaler (16), hydroperoxyl (17) och klor (18) [23]. Beroende på mängden NO_x bildas ozon eller förstörs ozon efter att hydroxidradikalerna har bildats [24].



Då andra ämnen som t.ex. peroxyradikaler, RO_2 , bildar kvävedioxid från kväveoxider, enligt ekvation (19), blir resultatet stora effekter på ozonkoncentrationen då de fortsätter att reagera med ozon enligt exempelvis ekvation (14) [19].



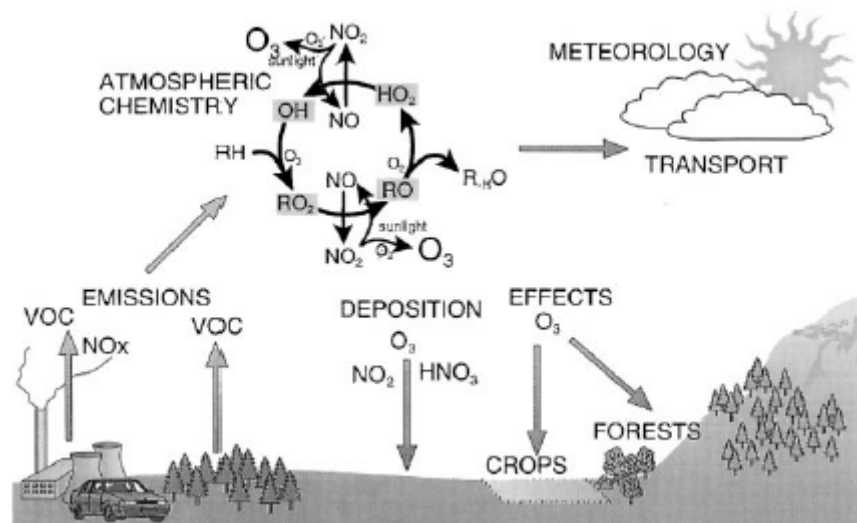
Peroxyradikaler i sin tur bildas genom nedbrytning av flyktiga organiska ämnen. Den viktigaste av dessa ekvationer är ekvation (20).



Den naturliga koncentrationsnivån av hydroxidradikaler korrigeras genom fotolys av ozon och reaktion med vatten. Under episoder av luftföroreningar finns det en nettoproduktion av hydroxidradikaler under dagen över den naturliga koncentrationsnivån. Då dessa startar kedjan av peroxyradikaler och deras bildande är det högst viktigt att hydroxyradikaler inte överstiger sin naturliga koncentrationsnivå. Peroxyacetylnitrat, PAN, kan bildas genom att acetaldehyd reagerar med en hydroxyradikal. Aldehyder är en viktig intermediär i reaktionskedjorna ovan. De bildas genom nedbrytning av kolväten och upplöses av solstrålning och bildar då radikaler [7].

Det är under dagen som bildandet av fotokemiska kemikalier sker. Vilket tidigare nämnts i avsnitt 4.1 är det också då blandningshöjden stiger, och det bildas ozontät luft, som blandas ned mot marken. Detta resulterar i en förhöjd koncentration av ozon på eftermiddagen [19]. Koncentrationerna av ozon är högst under sommarhalvåret vilket stämmer bra överens med samma teori av soltimmar och blandningshöjd [25].

Reaktionerna ovan, beskrivande ozonkemin i troposfären visas nedan i figur 3.



Figur 3: Processen för fotokemiska oxidanters formation och utfällning [26].

7 Luftföroreningsmodeller

Det finns även två angreppssätt för att modellera ämneskoncentrationer, ett som är baserat på Eulers ekvation och ett som är Lagrangebaserat. Det Eulerska sättet studerar hur luft passerar genom fixa punkter för att kunna beräkna riktning och hastighet av luftflöden. Nackdelen med ett Eulerskt angreppssätt är att man behöver integrera över ett väldigt stort område för att beräkna lufttransporter. Man kan även använda den Lagrangeska modellen, där man följer ett avgränsat luftpaket när det förflyttas över tid och rum. Med det angreppssättet

har den beräkningskrävande integrationen reducerats till att endast integrera över utvalda trajektorier över tid [27, 28].

I Lagrangemodellen antages att horisontell diffusion endast beror på längden på trajektorian, men meteorologiska förhållanden är i verkligheten också en faktor. Ett annat antagande är att den vertikala vinden påverkar endast den horisontella transporten, till en viss gräns, via horisontell dispersion [9].

Det finns som tidigare nämnt två olika tillvägagångssätt som används vid Lagrangesk modellering av luftföroeningar, en källorienterad och en mottagningsorienterad. Projektet har använt sig av det sistnämnda, eftersom man är intresserad av resultaten i ett fixt område [9].

De flesta gasformiga ämnena, utom ozon, har endast ett litet beroende av initiala värden då transporttiden längs trajektorian oftast är längre än livstiden för ämnet. För partiklar kan livstiden bli längre då de försvinner från luften endast med regnet eftersom de inte reagerar kemiskt [9].

För att få fram en modell som beräknar gas- och partikelkoncentrationer används horisontella beräkningar för flux över stora områden vilket ger mer verklighetstrogna beräkningar än om man endast baserar beräkningarna på lokala utsläpp. Man använder sig därför av storskaliga luftföroeningsmodeller, en av de mest kända är EMEP-modellen, utvecklad av European Monitoring and Evaluation Programme for Transboundary Long-Range Transported Air Pollutants (EMEP). EMEP har senare använts som grund för utvecklingen av den Lagrangeska modellen Atmospheric Chemistry and Deposition model (ACDEP). Modellen som används i projektet är däremot Eclair Ecosystem Surface Exchange Model (ESX), vilken är nära besläktad med de tidigare nämnda modellerna [9, 27, 29].

ESX är en relativt obeprövad modell som ännu inte är officiellt tillgänglig och saknar i skrivande stund full dokumentation. Därför kommer de andra modellerna att beskrivas mer grundligt. Avsnittet om ESX är därför inte lika genomgående av bakomliggande mekanismer, men eftersom den är baserad på de föregående nämnda modellerna kommer inte för mycket relevant information att förloras i förståelsen och beskrivningen av hur modellen fungerar.

7.1 EMEP

EMEP grundades 1977 som ett led i de europeiska ländernas försök att motverka problematiken med surt regn. Sedan 1979 har EMEP varit en nära integrerad del i Convention on Long-range Transboundary Air Pollution (CLRTAP), som är en legalt bindande konvention undertecknad av 51 länder. Konventionen säger att medlemsländerna ska arbeta för att begränsa och reducera utsläppen av luftföroeningar med fokus på långväga transporter. EMEP assisterar CLRTAP med vetenskaplig support när det gäller att övervaka och modellera utsläpp i atmosfären [30, 31].

Meteorological Synthesizing Centre-West (MSC-W) inom EMEP har skapat en kemisk transportmodell (CTM) som bygger på Eulerska beräkningar i rutnät om $50 \times 50 \text{ km}^2$. Dessa spänner över den europeiska kontinenten och studerar hur luft passerar genom fixa punkter, vilka

används för att kunna beräkna riktning och hastighet av luftflödet [9, 27]. Modellen kan numera simulera fotokemiska oxidanter samt organiska och ickeorganiska aerosoler lokalt såväl som globalt [31].

Konvektion är en viktig process för dynamiken i atmosfären, men den är svårt att parametrisera för användning i en kemisk transportmodell (CTM). Resultatet för olika parametreringar har visat på signifikanta skillnader för nederbörd och masstransport vid användning över mindre områden som Europa och därför är den modulen avstängd i EMEP om man inte gör beräkningar på en global skala [31].

7.2 ACDEP

En av de befintliga luftföroreningsmodellerna som har liknande ekvationer som ESX är ACDEP som är uppbyggd enligt ett Lagrangeskt angreppssätt och utvecklades av Danmarks Miljøundersøgelser (DMU). Följande avsnitt tar med de likheter och ekvationer som implementeras i många liknande modeller, där ibland ESX.

I ACDEP-modellen har kolonnen delats upp i flera skikt vars inbördes avstånd ökar logaritmiskt från markytan, där det första lagret har en maximal höjd på två meter och det sista två kilometer. Kolonnen är uppbyggd på det här sättet för att bäst återge verkligheten, eftersom föroreningar avges som deposition närmast marken samt att mängden luftföroreningsutsläpp minskar högre upp i atmosfären. För att beräkna de kemiska koncentrationerna används således inte bara utsläppen vid kolonnens position, utan även av partiklarnas vertikala dispersion, kemiska omvandling och kemiska deposition till marken [9].

Den meteorologiska datan och parametreringen av vertikal diffusion är baserat på en första endimensionell modell, [9]. Modellen använder sig av samma meteorologiska data som EMEP, där precisionen för datan är i rutnätsstandarden 150x150 km² med 6 timmars intervall för nederbörd och 12 timmar för blandningshöjd. De momentana vindfälten har också ett tidsintervall på 6 timmar och med parametern $\sigma = 0.925$ enligt den så kallade LAM150 (Limited Area Model 150x150 km²) vilket ger en selektiv höjd över terrängen med ungefär 600 meter för att representera majoriteten av luftföroreningarna på godtycklig plats [9, 32].

Massutbytet mellan de olika lagren i luftpaketet sker via första ordningens diffusionsekvation (21), där C är koncentrationen, t tiden, z höjden och K_s eddydiffusivitetskoefficienten som är beräknad via Monin-Obukhovs likhetsteori, ekvation (22), där $\kappa = 0.4$ är von Karman-konstanten, u_o är friktionshastigheten, L är Monin-Obukhov längden och Z_{mix} är lagrets blandningshöjd. Alltså beror varje lager i luftpaketet av blandningshöjden som förändras med temperaturen under dygnet. Φ_h är likhetsfunktionen för värme och $\frac{z}{L}$ är stabiliseringsparametern som ändrar definitionen för stabiliseringsfunktionen beroende på hur nära noll parametern kommer. $\frac{z}{L}$ är alltså förhållandet mellan höjden för varje lager och Monin-Obukhov-längden [33].

$$\frac{dC}{dt} = \frac{d}{dz} \left(K_s \frac{dC}{dz} \right) \quad (21)$$

$$K_s(Z) = \frac{\kappa u_o z}{\Phi_h(\frac{z}{L})} \left(1 - \frac{z}{z_{mix}}\right) \quad (22)$$

Vilken sorts landtyp som finns under luftpaketet är viktigt för hur mycket kemiska ämnen absorberas från luften. ACDEP tar hänsyn till huruvida underlaget är vatten eller land liksom många andra luftföroreningsmodeller. I allmänhet varierar underlaget med fler variationer än så vilket gör detta antagande relativt orealistiskt.

7.3 ESX-modellen

ESX har använts i projektet för att beräkna koncentrationer, och dess ekvationer är baserade på de som används i ACDEP, men tar även hänsyn till andra aspekter och ska förmodligen ge mer verklighetstroga resultat. Modellen, som är skriven i Fortran (f90/f95), är en endimensionell Langrangemodell och implementerar kod för emission, dispersion och kemisk deposition.

ESX baseras på (23) som är lik den för ACDEP (21), där χ och ρ är den torra respektive skalära luftdensiteten. K_z är eddykoefficienten och S representerar kemiska källor och sänkor.

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \rho K_z \frac{\partial (\frac{\chi}{\rho})}{\partial z} + S \quad (23)$$

Vid beräkning av kemisk deposition till marken används även samma resistansmetod (5) för lagerhöjder på ungefär 10 m. För höjder under 1 m så tar man, till skillnad mot de andra modellerna, mer hänsyn till utbytet med biosfären. De andra modellerna ser ofta terräng, även höga träd, som tunna horisontella ytor, "big leaf approximation". Det har varit en nödvändig förenkling i ett tidigt stadium av luftföroreningsmodeller eftersom utbytet med jordens ekosystem är komplext [29]. Dock har experiment gjorda i vindtunnlar visat på signifikant skillnad vid introduktionen av ytelement med fiberstruktur och varierande vegetationshöjd jämfört med simulerade ytor enligt "big leaf approximation" [10]. Interaktionen med biosfären är i de tidigare modellerna inkorporerat i det lägsta depositionsstaget i den kemiska transporten. Den ignoreras, mycket beroende på att korta tidsintervall för olika kemiska processer och vertikala koncentrationsgradienter vidare komplicerar all beräkning och analys i hela volymen för lagret [29]. Uppenbart är att detta är en förenkling som resulterar i beräkningsmässiga skillnader eftersom jordens landyta är till 31% täckt med skog [34, 29].

ESX däremot kan ta hänsyn till en rad olika landtyper som exempelvis vatten, gräs och flertalet olika typer av skog. Viktigt att nämna är dessutom att ESX inte är en komplett lufttransportmodell liksom de andra två, utan endast kan räkna ut koncentrationen av olika ämnen i luften om indata anges i form av trajektorier och mot dessa svarande meteorologiska data samt utsläppsdata [29].

Utbytet med jordens ekosystem är komplicerat bland annat eftersom de kemiska processerna är ickelinjära, det uppstår småskalig turbulens i kontaktytan mellan biosfären och atmosfären

och skog är den mest betydande källan för utsläpp av flyktiga organiska ämnen, VOC:er. VOC:er är så kallade prekursorer, de är som tidigare nämnt i avsnitt 6 en viktig del i processen att bilda andra ämnen, framförallt för ozon och sekundära organiska aerosoler, små partiklar som är fint fördelade i en gasmassa. Samtidigt fungerar skogsterräng som en sänka för ozon och andra gaser och partiklar [29].

8 Metod

8.1 Arbetsgång

Utgångspunkten för projektet var att öppna för ett mer dynamiskt användande av ESX-modellen som är beskriven ovan. Projektet skulle vara baserad på konceptet öppen källkod i enlighet med tidigare nämnda modell, för att fortsätta ambitionen att göra information och metoder mer lättillgängliga och så att scripten kan vidareutvecklas vid behov. Eftersom målet med projektet var att producera öppen källkod som bygger vidare på annan sådan var det naturligt att bygga upp det i en Linuxmiljö så som gjorts för tidigare projekt. Specificerat i projektbeskrivningen var också att script i språket Python skulle utvecklas under arbetet med syfte att extrahera data som sedan kan användas som input till den Lagrangeska ESX-modellen.

Gruppmedlemmarna hade sedan tidigare varierande vana och kunskaper vad gäller Linux och programmering i Python. Beroende på tidigare erfarenheter och intresse delades arbetet upp i två huvudsakliga delar; en mer programmeringsteknisk och en mer teoretisk. Av både praktiska och vetenskapliga skäl användes olika tillvägagångssätt för att få tillgång till en Linux-miljö som t.ex. explicita linuxdistributioner, MinGW⁸ eller Cygwin⁹. Detta beskrivs ytterligare i avsnitt 8.2.1.

Den programmeringstekniska delen av arbetet har gått ut på att steg för steg färdigställa kompletta luftföroreningsmodeller med ESX-modellen som bas. I avsnittet 8.2.4 beskrivs själva arbetet och i avsnitt 8.3 hur modellerna i sig fungerar.

De teoretiska delarna av arbetet sammanfattade i avsnitten 4,5,6 och 7 utgår från de kunskaper kring meteorologi, atmosfärs kemi och luftföroreningsmodeller i allmänhet som gruppen tillgodogjort sig under arbetets gång genom läsning av artiklar och dylikt.

Slutligen har omfattande försök till verifiering av den framtagna programvaran, genom jämförelse modeller och mätstationer emellan. Dessutom har de framtagna modellernas resultat jämförts imbördes.

⁸<http://www.mingw.org/>

⁹Mer information om Cygwin på <http://sv.wikipedia.org/wiki/Cygwin>

8.2 Programvara

8.2.1 Operativsystem

Eftersom de flesta i gruppen använde Windows och det ansågs vara ett onödigt radikalt ingrepp att byta operativsystem började de flesta med att testa Cygwin för att skapa en simulerad miljö där modellen kunde köras. Cygwin är ett programbibliotek för Windows som tillämpar POSIX, vilket gör att programmet följer en standard för hur programmeringsgränssnittet i Unix-baserade system är strukturerat. Det här gör att Cygwin kan kompilera kod från en annan plattform som följer POSIX, i det här fallet Linux, för användande på Windows [35]. Problemen visade sig dock vara många och komplicerade att lösa om man inte var insatt i strukturen av programvaran. Problem som uppstod var bland annat att förstå vilka och komma över de nödvändiga paket som programmet behövde, generera diagram med ESX-modellen samt skriva och läsa data ur netCDF-filer.

Efter att mycket tid hade lagts på att försöka få det att fungera och som följd hamnat efter i tidsschemat så började alternativa lösningar användas, förutom ovanstående lösning med att byta operativsystem. Den programvara som användes som substitut för Cygwin var MinGW (Minimalist GNU for Windows) som i motsats till Cygwin använder Windows egna programmeringsgränssitt med en portad version av GCC. MinGW används tillsammans med MSYS (Minimal System) som är en kommandotolksmiljö med vissa Unix-verktyg, tillsammans bildar de en simulerad Linuxmiljö med kommandotolken MSYS som interagerar med kompilatorn MinGW [36].

Delar av gruppen använde även Virtual Box, som installeras på befintligt operativsystem men som under det kan skapa virtuella maskiner med andra operativsystem som bas. Körandet av ESX-modellen via Virtual Box visade sig senare ha problemet att RAM-minnet inte räckte till vid körandet av stora datafiler med meteorologisk data. Detta skulle dock troligen fungera bra på en dator med bättre RAM-minne.

8.2.2 Python

I inledningen nämndes att Python är vårt huvudsakliga verktyg för modellering, datahantering och figurskapande i arbetet. Samtidigt är ett bibliotek av Python-script en av slutprodukterna av projektet. Python är ett högnivåspråk som är designat för god läsbarhet och tungt fokus ligger på att koden ska bli så lätt att läsa och förstå som möjligt [37, 38].

Jämfört med andra välanvända programmeringsspråk som exempelvis Java eller C++ är syntaxen betydligt enklare och koden mer läsbar. Som några grundläggande exempel kan nämnas är att i Python till skillnad mot de båda andra språken behöver inga datatyper deklarerats och inte heller används exempelvis semikolon för att avsluta rader. Kodblock behöver inte heller avskiljas med klamrar av något slag utan detta görs helt med hjälp av normal indentering av koden [39].

Förvisso var det på förhand bestämt i projektbeskrivningen att det var just Python som skulle användas, men i praktiken hade vi kunnat välja ett annat språk om det hade varit så att det passat våra syften bättre. Kombinationen av Pythons enkla syntax, att det var

föreslaget på förhand tillsammans med att delar av gruppen sedan tidigare hade relativt begränsade programmeringskunskaper gjorde att valet föll på att arbeta i Python.

8.2.3 Databehandling

En stor del av den data som använts i projektet finns inte att tillgå i några vanliga enkla filformat, utan i mer anpassade och avancerade format som den som inte är insatt i världen av vetenskapliga data knappast är bekant med. Därav förklaras ett flertal av dessa filtyper och dylikt nedan.

NetCDF (Network Common Data Form) är en uppsättning mjukvarubibliotek och plattformsoberoende data-format som används för att skapa, dela och hantera data i arrayer. NetCDF betecknar alltså både mjukvarubiblioteket och själva filtypen och används i stor utsträckning för att hantera vetenskapliga data; i vårt fall meteorologi- och utsläppsdata. NetCDF-filer är uppbyggda som flerdimensionella tabeller där de ingående variablerna på olika sätt kan, men inte nödvändigtvis måste, vara inbördes beroende av varandra [40]. Exempelvis kan variabeln "temperatur" vara beroende av de i filen andra ingående variablerna "tid", "latitud", "longitud" och "höjd" och samtliga dessa behöver specificeras för att få ut ett enskilt värde på den av de andra beroende variabeln "temperatur".

GRIB ((GRIdded Binary eller General Regularly-distributed Information in Binary form) är ett komprimerat dataformat vars vanligaste användningsområde är att lagra meteorologiska data [41]. I vårt projekt hanteras dock ingen direkt utläsning av data ur GRIB-filer utan de används endast för vidare konvertering till tredjepartsprogrammet HYSPLIT beskrivet i avsnitt 5.

8.2.4 Programmeringstekniskt

Trots viss programmeringsvana hade inte samtliga vars huvudsakliga uppgift kom att bli programmeringsarbete programmerat i Python tidigare. Därför lades i början en del tid på grundläggande Python-programmering för att komma in i språkets syntax. För att komma in i syntaxen på ett bra sätt och eftersom det kändes svårt att direkt börja skriva omfattande Pythonscript användes därför Codecademy¹⁰ för att få tillgång till enklare problem att öva på.

All kod delades på GitHub¹¹ som är ett delningscenter av programmeringsprojekt, vilket hjälpte gruppen att enkelt synkronisera sina skriptbibliotek sinsemellan.

Huvuddelen av programkoden som har utvecklats under projektets gång har skrivits för extraktion av olika sorters data. Det ansågs relativt meningslöst att i detalj beskriva den här koden för läsaren och hänvisar därför den speciellt intresserade till programkoden på GitHub och till avsnitt 8.2.3 som behandlar databehandling specifikt. Den grundläggande funktionaliteten går dock att beskriva, vilket görs nedan övergripande i avsnitt 8.3 och utvalda detaljer i avsnitten 8.5 och 8.6.

¹⁰Interaktiv kodinläring, <http://www.codecademy.com/>

¹¹<http://en.wikipedia.org/wiki/GitHub>

8.3 Grundläggande funktionalitet hos modellerna HY-ESX och EStrax

ESX-modellen som var utgångspunkten för arbetet och fungerar i princip på så sätt att den är en beräkningsmotor som tar hänsyn till atmosfärskemi och meteorologi. För att med denna som bas skapa en komplett luftföroreningsmodell krävs att denna körs längs en trajektoria. För varje koordinatsteg i en trajektoria kräver då ESX följande indata i tillägg till koordinaterna i sig:

- Datum och tid
- Vindhastighet
- Relativ luftfuktighet
- Temperatur
- Lufttryck
- Blandningshöjd
- Utsläppsdata

Programkoden som har skrivits under arbetets gång har till uppgift att förse ESX med ovanstående indata. Två olika metoder för generering av trajektorior har använts, vilket har mynnat ut i två kompletta luftföroreningsmodeller nämligen *HY-ESX* och *EStraX*.

8.3.1 HY-ESX

Modellen *HY-ESX* fungerar i stora drag som en brygga mellan trajektoriamodellen HYSPLIT och ESX-modellen. Hur HYSPLIT fungerar explicit beskrivs noggrant i avsnitt 8.4.1, men för nu räcker det att veta att det är ett gratisprogram som genererar trajektorior. HYSPLIT förses med nödvändig meteorologisk data och kan på så vis producera en trajektoria med tillhörande meteorologisk data. Programkoden bakom *HY-ESX* utnyttjar sedan dels själva koordinaterna för trajektorian för att möjliggöra utläsning av data ur utsläppsfiler och läser dels in meteorologisk data direkt från HYSPLIT. Då all relevant data är inläst behandlas denna och ges de format som ESX kräver. Slutligen skrivs allt till en CSV-fil som ges som indata till ESX, vilken därmed kan köras.

8.3.2 EStrax

EStraX är den andra av de två fullständiga luftföroreningsmodeller som producerats under arbetets gång. Modellen bygger till skillnad från *HY-ESX* inte på trajektorior genererade av något tredjepartsprogram som HYSPLIT, utan koden är istället skriven för att själv integrera fram trajektorierna direkt från meteorologisk data. Då trajektorians koordinater tagits fram används dessa för att läsa relevant meteorologisk- och utsläppsdata ur netCDF-filer. Precis som i fallet med *HY-ESX* genereras en CSV-fil med indata som kan användas av ESX.

8.4 Genererade trajektorior

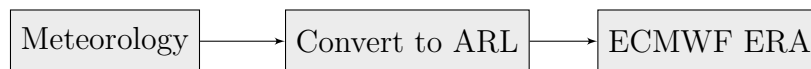
Trajektoriorna är på många sätt det allra mest grundläggande för det arbete vi har gjort. De slutgiltiga resultaten, till exempel i form av plottar över luftkoncentrationer, produceras visserligen av ESX-modellen, men detta kräver, som nämnts tidigare, en rad indata som i sin tur bygger på hur luftmassorna transporterats.

Under projektets gång har som tidigare nämnts två olika tillvägagångssätt för att generera trajektorior gjorts. Anledningen till att just dessa valdes var på grund av att *HYSPLIT*-modellen tidigare använts i stor utsträckning, samt att kontrollen ökar över de trajektorior som beräknas själva utan de problem *HYSPLIT* för med sig. Följaktligen blir där en intressant jämförelse mellan de bådas resultat.

8.4.1 HYSPLIT

HYSPLIT tillhandahålls av Air Resources Laboratory (ARL)¹² genom National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA)¹³ som är ett vetenskapligt organ i USA:s handelsdepartement. Versionen som används i projektet är den senaste, nämligen *HYSPLIT_4*. Vidareutveckling av denna modell har ej varit en av arbetsuppgifterna i projektet, utan *HYSPLIT* har använts som ett färdigt verktyg för att generera trajektorior och data. Dessa har jämförts med de egengenererade trajektoriorna, både med avseende på trajektoriornas utseende och resultat efter körning i ESX-modellen.

För kunna hämta och använda Linux-versionen av modellen behövdes en registrering på ARL:s hemsida göras, och eftersom de inte kunde verifiera att projektmedlemmarna var inskrivna på Chalmers Tekniska Högskola (CTH) behövdes även projektets handledare involveras i registreringsprocessen. Trajektoriorna genererades med hjälp av meteorologisk data från ECMWF, som hade ursprungsformat GRIB och behövde konverteras till ARL:s egna format (.ARL). Konverteringen kunde utföras utan större svårigheter i *HYSPLIT*:s grafiska gränssnitt, figur (4), och var möjlig eftersom *HYSPLIT* stöder det vertikala koordinatsystem, Hybrid Absolute Pressure Sigma, som data från ECMWF är baserad på.



Figur 4: Konvertering från GRIB- till ARL-fil i *HYSPLIT*:s grafiska gränssnitt.

ESX-modellen behöver matas med meteorologisk data och utsläppsdata, en del av den meteorologiska datan är möjlig att få direkt från *HYSPLIT* medan resterande erhålls med hjälp av våra Python-script. För att välja vilka data som ska skrivas ut till outputfilen från trajektoriamodellen vid körning behövdes ytterligare inställningar göras, figur 5.

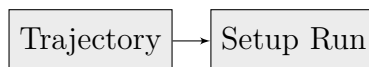
Modellen kördes sedan efter ytterligare inställningar där antalet trajektorior, meteorologisk data och bakåt- eller framåttrajektorier valdes, figur 6.

¹²<http://www.arl.noaa.gov/>

¹³<http://www.noaa.gov/>



Figur 5: Val av vilka parametrar som ska skrivas ut i textfilen som genereras när HYSPLIT körs.



Figur 6: Inställningar i HYSPLITs grafiska gränssnitt där bland annat antalet och vilken typ av trajektorier och meteorologisk data väljs. De olika trajektorierna kan startas vid olika höjder samt väljas till bakåt- eller framåtintegrerade.

Det finns även möjlighet att generera trajektorier dagligen, istället för att skapa de en åt gången, genom att använda verktygen i "Special runs", figur 7. Respektive trajektorias körningslängd ställs in som vanligt i "Setup Run" och påverkas inte av de nya, ovan nämnda inställningarna. Detta var användbart för att hitta en specifik dag där koncentrationerna utmärkte sig från andra dagar.



Figur 7: Generering av flera flerdagstrajektorier, bakåt- som framåtintegrerade, i HYSPLITs grafiska gränssnitt.

De trajektorier som vi har genererat med HYSPLIT är så kallade bakåttrajektorier, som sträcker sig över 96 timmar med slutpunkt i Göteborg, Råö och Beijing.

8.4.2 EStrax

Den modell som används för egna beräkningar är baserad på HYSPLIT och består i princip bara av en enkel integreringsmetod. Datan som används är främst hastighetsdata från ECMWF och det koordinatsystem som använts är detsamma, d.v.s. latitud, longitud och tryck.

Den integrationsmetod som använts har främst varit trapetsmetoden, vilken är vad HYSPLIT och FLEXTRA använder. För att hantera data under den lägsta trycknivån (1000 millibar) har en logaritmisk extrapolering gjorts i likhet med HYSPLIT från den lägsta trycknivån till noll vid marknivån.

Den kod som används för beräkningarna är dock mycket modulär och stöd finns för andra dataset, integrationsmetoder (särskilt Euler- och RK4-metoderna) och koordinatsystem.

EStraX-trajektorierna som jämförs med HYSPLIT är 96-timmars bakåttrajektorier likt de från HYSPLIT. Trajektorierna som använts för att jämföra med mätdata från Råö och Gucheng är dock sju respektive fem dagar långa.

Tabell 1: Meteorologiska data som hämtas från ECMWF och ges till HYSPLIT för trajektorriaberäkning.

Namn	Enhet
1D	
Geopotential	m
2D	
Horisontella vindkomponenter (u-,v-vind), 10 meter över marken	m/s
Temperatur vid 2 meters höjd	K
Total nederbörd	mm
3D	
Horisontella vindkomponenter(u-,v-vind)	m/s
Vertikal vind	m/s
Relativ luftfuktighet	%
Geopotential	m

8.5 Meteorologiska data

Oavsett vilken metod som används för att ta fram trajektorior krävs en rad meteorologiska data av två olika anledningar. Dels krävs meteorologisk data för generering av trajektorior och dels kräver ESX information om de rådande meteorologiska förhållandena för att kunna göra beräkningar. Till en början tillhandahölls viss testdata från handledarens sida, men sedan har data från ECMWF använts genomgående. Genom ett av ECMWF:s projekt, ERA/INTERIM, finns meteorologiska data tillgängliga från 1979 till 2014 och är fritt nedladdningsbart för den som registrerat sig. Detta är fritt för vem som helst att göra och därmed bibehålls ”open source”-karaktären på projektet.

Användaren väljer vilka data och vilket tids spann hen vill ha tillgång till och därefter kan datan laddas ner i en rad olika filformat. För våra syften har netCDF-filer för direkt dataextraktion med Python och GRIB-filer för indata till HYSPLIT använts. Den data som har använts är listad i tabell 1.

Vad gäller den HYSPLIT-baserade modellen, *HY-ESX*, ges ECMWF-data till HYSPLIT för generering av trajektorior, men majoriteten av indatan till ESX-modellen läses in direkt från HYSPLIT vilket beskrivits i avsnitt 8.3.1 Data gällande blandningshöjd tas dock inte direkt från HYSPLIT eftersom denna data visade sig orimlig (eller åtminstone skiljde rejält från ECMWF:s data). Denna tas därför direkt från ECMWF. I fallet med *EStraX* tas all meteorologisk, både för trajektorigenerering och indata till ESX, från ECMWF.

8.6 Utsläppsdata

Den utsläppsdata som används är formaterad så att ett utsläppsvärde fås för varje koordinat, alltså par av latitud- och longitud-värden. Arean över vilken denna mängd släppts ut är en tänkt rektangel kring denna punkt med bredd ett longitudsteg och höjd ett latitudsteg. Dessa steg varierar över jordens yta och därmed även areorna. För att areorna ska kunna beräknas

krävs att det görs möjligt att ta fram avstånden mellan två koordinater. Avståndet mellan två koordinater kan beräknas enligt

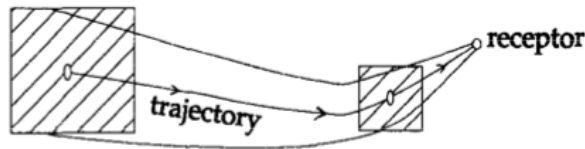
$$d = R\theta \quad (24)$$

där R är jordens medelradie och θ är centralvinkeln¹⁴ beräknas enligt

$$\theta = 2\arctan\left(\frac{\sqrt{a}}{\sqrt{1-a}}\right) \quad (25)$$

där $a = \sin^2\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) + \cos(\phi_1)\cos(\phi_2)\sin^2\left(\frac{\Delta\lambda}{2}\right)$

På grund av den osäkerhet som finns i genererade trajektorier medelvärderas utsläppsdatan beroende på avståndet till receptorpunkten, se figur 8.



Figur 8: Trajektorier passerar det tänkta rutnätet, vars storlek ökar med avståndet från receptorpunkten [9].

9 Resultat

Slutprodukten av detta kandidatarbete är framförallt ett bibliotek av Python-script som innefattar de båda luftföroreningsmodellerna *HY-ESX* och *EStraX*. Modellerna är utformade för generering av trajektorier, datahantering samt körning av ESX-modellen. All programkod bakom modellerna finns att beskåda på projektets GitHub-konto¹⁵ och användarmanualer för såväl *HY-ESX* som *EStraX* finns i appendix A.

9.1 Genererade trajektorier

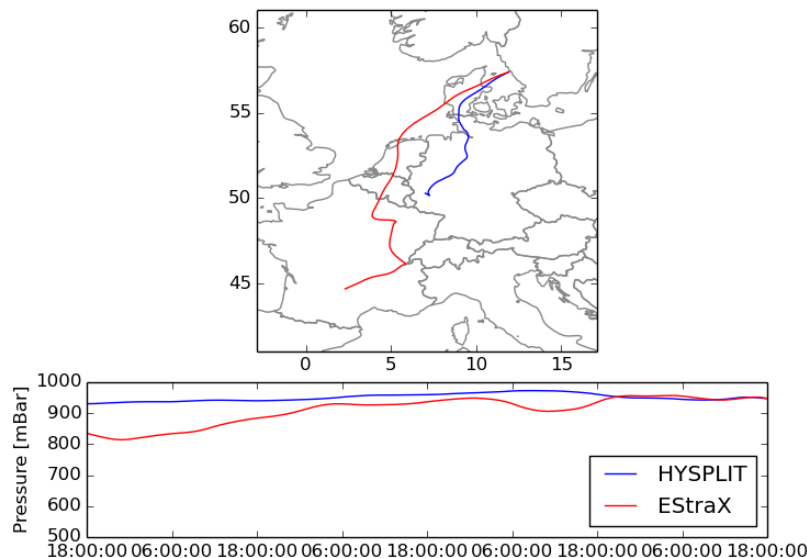
I de slutgiltiga luftföroreningsmodellerna har 96 timmars bakåtintegrerade trajektorier genererats, med hjälp av meteorologisk data från ECMWFs databas. Figurerna 9, 10 och 11 illustrerar exempel på trajektorier, från båda trajektoriamodellerna, i områdena Göteborg, Beijing respektive Råö. Trajektorierna med samma höjd i receptorpunkten har använts som bas för de illustrerade koncentrationsberäkningarna i avsnitt 9.1.1.

Figur 9 visar på skillnader mellan trajektorierna i både position och tryck vid startpunkten, dock försvinner skillnaderna i slutpunkten vilket också är meningen eftersom de båda bakåttra-

¹⁴Centralvinkel http://en.wikipedia.org/wiki/Central_angle

¹⁵<https://github.com/farpoke/EStraX>

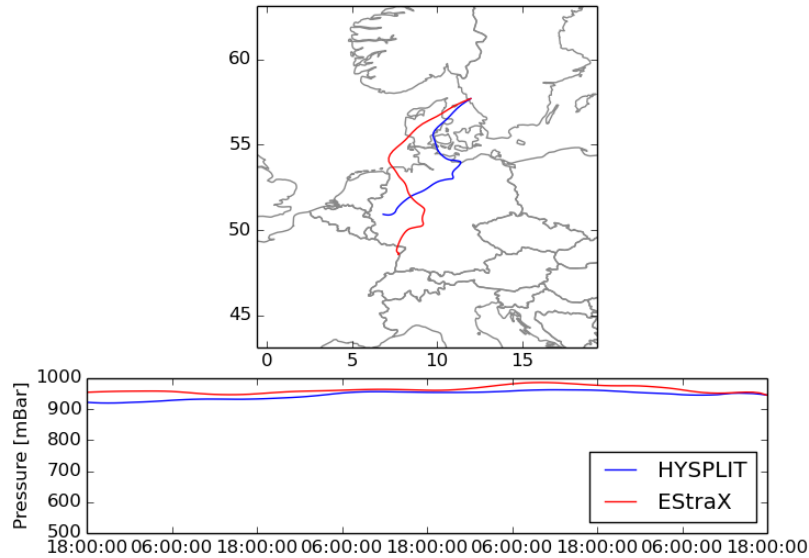
jektoriorna har genererats utifrån samma utgångspunkt. *EStrax*-trajektorian är den längre av de två och går längre västerut och över Nordhavet, dessutom varierar denna trajectoria mer i tryck och ligger hela tiden under trycknivån för HYSPLIT-trajektorian.



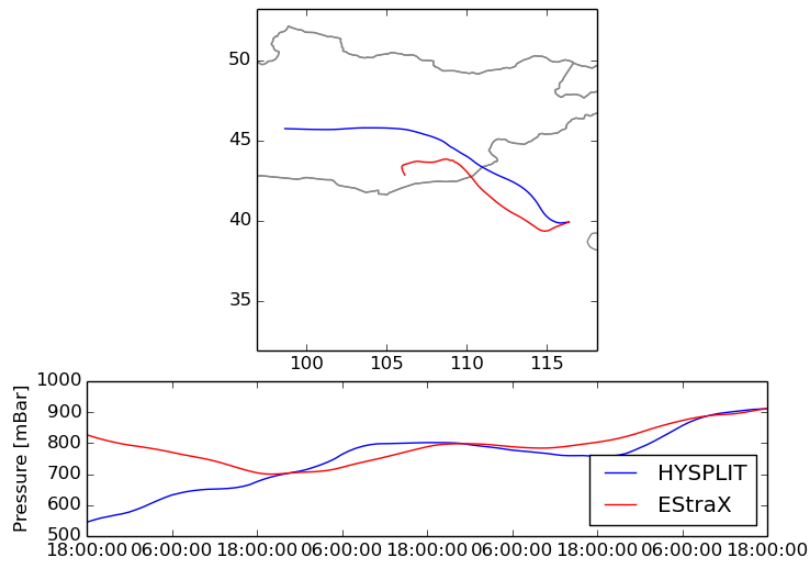
Figur 9: 96 timmars bakåtttrajektorier genererade av HY-ESX (blå) och EStrax (röd) med receptorpunkt på Råö 28:e juli 2013 klockan 18:00.

Trajektorierna i figur 10 slutar båda som väntat i Göteborg efter att ha kommit söder ifrån kontinenten. Den av *EStrax* genererade trajektorian går dock mer över vatten då den svänger mer västerut ut över Nordhavet. Båda trajektorierna står för relativt små tryckskillnader till skillnad från i figur 9, där *EStrax*-trajektorian utmärkte sig.

Figur 11 illustrerar 96-timmars bakåtttrajektorier från Beijing. Noterbart är att i tryckplotten kan man generellt se reativt stora tryckvariationer och att de två trajektorierna kommer från vitt skilda trycknivåer i ursprungsläget 4 dagar tillbaka, då HYSPLIT-trajektorian härstammar från ett tryck kring 550 mbar och *EStrax*-trajektorian från drygt 800 mbar.



Figur 10: 96 timmars bakåtrajektorior genererade av HY-ESX(blå) och EStrax (röd) med receptorpunkt i Göteborg 28:e juli 2013 klockan 18:00



Figur 11: 96 timmars bakåtrajektorior genererade av HY-ESX (blå) och EStrax (röd) med receptorpunkt i Beijing 28:e juli 2013 klockan 18:00

9.1.1 Koncentrationer beräknade med ESX

Jämförelsen mellan uppmätta och beräknade koncentrationer för mätstationen Råö i figur 12 visar på en någorlunda korrelation mellan ozonkoncentrationerna, dock är det svårare

att utläsa något vettigt för resterande data. Samtliga koncentrationer är givna för varje timme utom för de uppmätta NO_2 - och SO_2 -koncentrationerna, där data endast fanns för varje dag vilket också syns tydligt på formen. Sjudagars bakåtrajektorier har använts för koncentrationsjämförelsen på Råö och femdagars bakåtrajektorier i Gucheng.



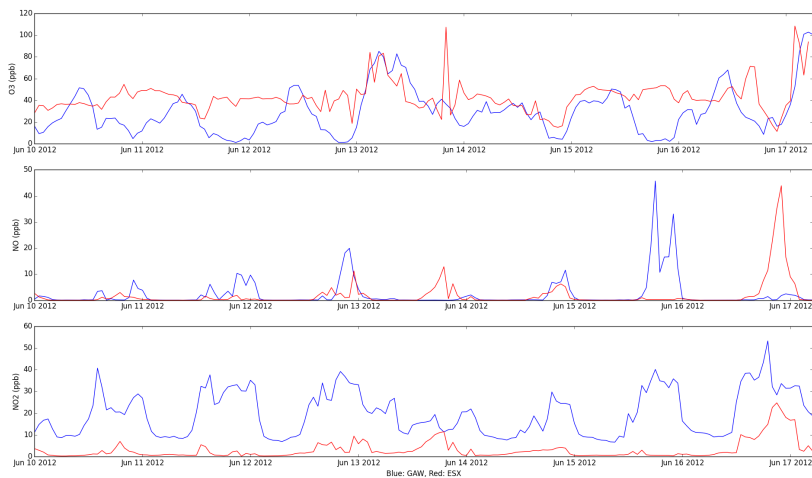
Figur 12: Jämförelse mellan koncentrationer av ozon, kvävedioxid och svaveldioxid som uppmätta av mätstationen Råö och som beräknade med ESX utifrån sjudagarstrajektorier med data för varje timme.

Koncentrationer för mätstation i Gucheng utanför Beijing, illustrerade i figur 13, visar till skillnad från de i figur 12 att beräknade ozonkoncentrationer är högre och varierar mindre per dygn jämfört med de uppmätta. Vid jämförelse mellan de uppmätta värdena för NO_x och ozon kan en korrelation mellan lägre ozonkoncentrationer och högre NO_x -koncentrationer noteras, emellertid visar de beräknade NO_x -koncentrationerna stor variation gentemot de uppmätta.

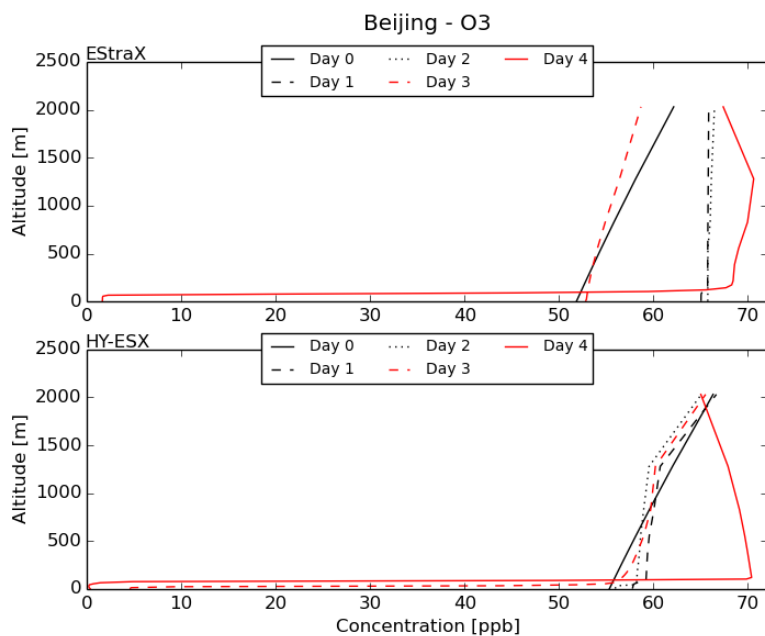
Figurerna 14, 15, och 16 visar exempel på ozonkoncentrationsberäkningar gjorda med ESX-modellen för respektive trajektoria. Det blir därmed en jämförelse mellan trajektorierna genererade av *EStrax*- respektive *HY-ESX*-modellen, eftersom koncentrationerna i sig beror på position och tid.

Ozonkoncentrationerna i figur 14 visar på liknande beteende mellan modellerna, alltså relativt konstant koncentration vid högre höjder som sedan minskar närmare marken. Det kan även observeras att ozonkoncentrationerna ökar då trajektorierna anländer i Beijing. Dessutom är det bara i det området som det sker deposition vid lägre höjder.

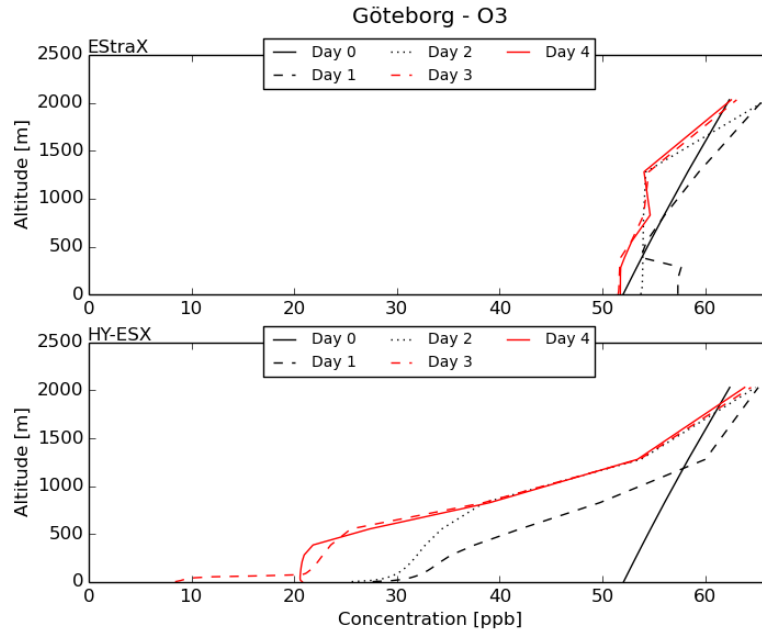
Vid jämförelse av luftföroreningsmodellernas ozonkoncentrationer i Göteborg och på Råö, figur 15 och figur 16, kan det observeras att dessa är relativt lika vid höga höjder, men att deposition sker mycket tidigare och i större grad för *HY-ESX*-modellen.



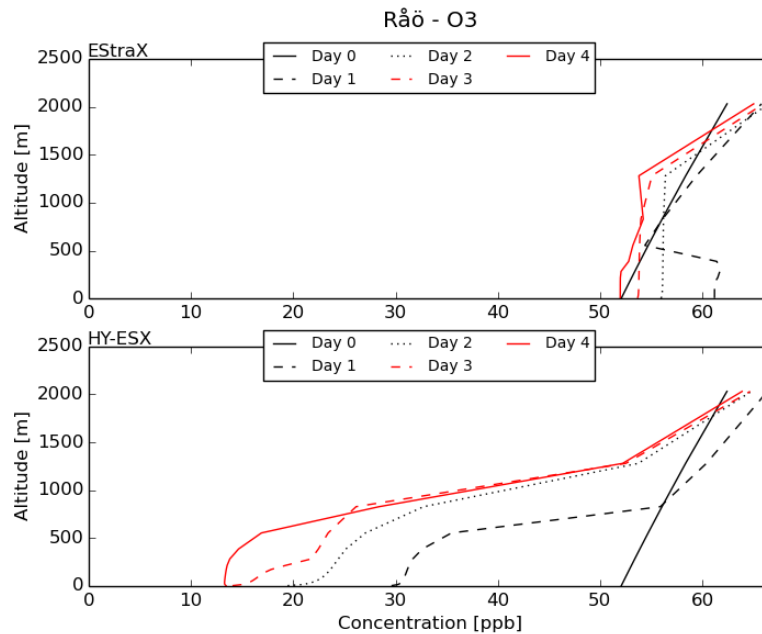
Figur 13: Jämförelse mellan koncentrationer av ozon, kvävemonoxid och kvävedioxid som uppmätta av mätstationen Gucheng nära Beijing och som är beräknade med ESX utifrån femdagarsstrajektorior.



Figur 14: Koncentrationer för ozon beräknade av ESX baserade på fyradagarstrajektorior från Beijing genererade med HYSPLIT (HY-ESX) och EStRaX. Trajektorierna illustreras i figur 11 och når fram till Beijing 2013-07-28 klockan 18:00.



Figur 15: Koncentrationer för ozon beräknade av ESX baserade på fyradagarstrajektorier från Göteborg genererade med HYSPLIT (HY-ESX) och EStrax. Trajektorierna illustreras i figur 10 och når fram till Göteborg 2013-07-28 klockan 18:00.



Figur 16: Koncentrationer för ozon beräknade av ESX baserade på fyradagarstrajektorier från Råö, utanför Göteborg genererade med HYSPLIT (HY-ESX) och EStrax. Trajektorierna illustreras i figur 10 och når fram till Råö 2013-07-28 klockan 18:00.

10 Diskussion och slutsats

10.1 Trajektoriamodeller

Syftet med projektet var att komplettera ESX med en trajektoriamodell samt inmatning av utsläppsdata och meteorologisk data för att skapa en fullfjädrad dynamisk kemisk transportmodell (CTM). Först gjordes efterforskning och då insågs att HYSPLIT-modellen tidigare hade använts flitigt vid olika typer av studier som behandlar transport av luftföroreningar och partiklar, vilket indikerade att det fungerat bra. HYSPLIT är en fri programvara under förutsättning att användaren registrerar sig, vilket visade sig vara en krånglig process. Bland annat krävdes intyg från en berörd institution, vilket inte alla tänkta användare nödvändigtvis har tillgång till. Den här processen tog tid och gruppen började söka alternativa lösningar på problemet. En egenproducerad trajektoriamodell började därför att utvecklas. Tillgången till HYSPLIT blev senare godkänd vilket gjorde att två modeller utvecklades parallellt. Det här introducerade en ny dimension till projektet eftersom verifiering av de egengenererade trajektorierna kunde utföras genom jämförelse med de som genererats av HYSPLIT. För fortsatt open source-karaktär av luftföroreningsmodellen rekommenderas *EStraX* för trajektoriberäkning eftersom det då inte krävs godkännande av NOAA. HYSPLIT däremot är en sedan tidigare beprövad modell för trajektoriberäkning och är vetenskapligt accepterad, vilket ger den något högre trovärdighet än *EStraX*.

10.1.1 HY-ESX

Vår tanke med att använda oss av befintlig programvara i form av HYSPLIT var att göra arbetet med trajektorier så enkelt som möjligt. Denna modell är i dagsläget konstruerad så att användaren behöver använda dels ECMWF:s hemsida och dels HYSPLIT:s grafiska gränssnitt. Detta ger förvisso en bra tydlighet och förståelse för användaren, men kan samtidigt anses vara onödigt krångligt och tidsineffektivt. Ett naturligt steg för vidareutveckling av modellen skulle i första hand vara att utveckla moduler för automatisk körning av HYSPLIT och automatisk datahämtning från ECMWF:s databas. En automatisk hämtning av trajektoriadata från HYSPLIT med ett pythonskript baserat på ett pågående open source-projekt kallat *physplit* undersöktes för eventuell användning i modellen. Detta visade sig dock ligga utanför projektets tidsram. En grundligare undersökning av detta rekommenderas som vidare studier för den intresserade.

10.1.2 EStraX

Modellen är uppbyggd för att göra det enkelt för användaren att ytterligare utveckla modellen med ESX som bas. Den har tillämpat en modulstruktur som ökar förståelsen över hur koden fungerar. Det här gör att man lätt kan använda relevanta delar för vidareutveckling.

Ett förslag till vidareutveckling skulle kunna vara att skapa ett GUI, ett grafiskt användargränssnitt, för modellen. Detta skulle göra modellen mer användarvänlig eftersom man tar bort momentet av terminalkörning och ändring i programkoden.

10.2 ESX-modellen

Tanken från början var att lyckas verifiera de konstruerade modellerna med hjälp av olika fallstudier. På grund av buggar i ESX-modellen har detta tyvärr inte lyckats. Det här projektet var första gången ESX-modellen testas som Lagrangesk modell och det har visat sig att den inte var fullt så färdig som upphovsmännen uppskattat. En del problem har upptäckts och rättats till efter felsökning och tester, men alla fel är troligen inte avhjälpna och ytterligare tester krävs. Dessutom har några av de upptäckta felen inte åtgärdats i tid för att justerade körningar skulle kunna göras till denna rapport. Som exempel kan nämnas att de av ESX uträknade koncentrationerna varierade över flera storleksordningar bara dagarna före arbetets inlämning beroende på vilka buggar som åtgärdats.

Ovan nämnda buggar gör exempelvis att ESX-modellen inte hanterar ozon på ett fullständigt korrekt sätt. De i avsnitt 9.1.1 behandlade dagarna är valda bland annat för att visa på en uppbyggd ozontopp på Råö som observerats i verkligheten, men som inte svarar mot vad som räknats ut av ESX. Visserligen skulle det här även kunna bero på mätfel, men är inte särskilt troligt.

Av ovanstående anledning är koncentrationsberäkningarna i denna rapport ytterst osäkra och bör snarast ses som exempel på vilka beräkningar som kan göras med ESX och vilka jämförelser som i framtiden kan göras med en fullständigt fungerande modell.

Utveckling och felsökning av ESX-modellen har dock aldrig varit en uppgift i det här kandidatarbetet och påverkar inte det egentliga slutresultatet. Den under arbetet utvecklade programvaran sköter sin uppgift bestående i att försöka ESX med trajektorier och insamlad data. Att beräkningarna sedan blir fel ligger utanför projektets ramar.

10.3 Genererade trajektorier

Noterbart från avsnitt 9.1 är att trajektorier beräknade av HYSPLIT respektive *EStraX* divergerar en hel del. En liten förändring i startposition, som till exempel mellan Göteborg (figur 10) och Råö (figur 9), ger skillnad i utseende hos trajektorierna. Skillnaderna beror inte endast på startposition, utan också på att trajektoriamodellerna är uppbyggda på olika sätt. Dessa fenomen är också följder av en sorts kedjereaktion som uppstår i beräkningarna, eftersom små skillnader i startposition alternativt uträknad position längs en trajektoria leder till att vind och tryck skiljer sig åt och därmed kan trajektorierna börja avvika från varandra.

Noterbart från flera av trajektoriaplottarna är att trajektoriernas längd skiljer sig betydligt mellan modellerna. I figur 9 är *EStraX*-trajektorian betydligt längre än den som genererats av HYSPLIT och i figur 11 är det istället HYSPLIT-trajektorian som är den klart längre. Detta torde i båda fallen ha sin förklaring i på vilken trycknivå trajektorierna befunnit sig. En lägre trycknivå tyder på högre höjd och högre höjd implicerar i sin tur överlag högre vindhastigheter. En trajektoria som befunnit sig på högre höjd har därmed kunnat transportera sig en längre sträcka. Denna teori stämmer överens med jämförelserna i både figur 9 och figur 11. Dessutom ligger trajektorierna i figur 10 på ungefär samma trycknivå genom hela förloppet och får därmed jämförbara totala längder.

10.4 Beräknade koncentrationer

Det syns i avsnitt 9.1.1 en viss skillnad i beräknade koncentrationer för de båda modellerna. Den troliga förklaringen till hur stora skillnader det blir ligger i hur de för beräkningarna bakomliggande trajektorerna sett ut. I fallet med figur 15 och figur 16, vilka visar på de största skillnaderna i ozonkoncentration modellerna emellan, finns det en betydande skillnad i trajektorerna som ligger till grund för beräkningarna. I figurerna 9 och 10 syns trajektorernas beteende. Här kan vi i båda fallen se att trajektorerna beräknade av HYSPLIT rör sig mer i Tyskland än trajektorerna beräknade av *EStRaX*. De jämförelsevis högre koncentrationerna beräknade med HYSPLIT-trajektorier skulle därför kunna bero på högre utsläpp av NO_x i de områden de passerat jämfört med trajektorerna beräknade av *EStRaX* som rört sig mer över hav och närmare kusten.

Koncentrationerna i figur 14 baserade på trajektorier från figur 11 liknar varandra betydligt mer än de i exemplet ovan och har i stora drag liknande utseende över samtliga fyra dagar. En förklaring till detta kan vara att trajektorerna båda håller sig över land till skillnad från i figurerna 9 och 10 där underlagen skiljer betydligt mer mellan trajektorerna. Samt att trajektorerna följer varandra väl vad gäller position och tryck de första tre dagarna.

Någon större vikt ska dock inte läggas på koncentrationernas storlek i exemplen ovan på grund av de problemen ESX-modellen som behandlats i avsnitt 10.2

10.5 Medelvärdering

ESX-modellen har endast stöd för beräkningar längs en ensam trajektoria åt gången, vilket ger upphov till en hel del osäkerhet. Effekterna av detta har behandlats i avsnitten 10.3 och 10.4. För att motverka dessa osäkerheter har i möjligaste mån olika typer av medelvärdering använts beroende på tillgänglig datorkraft. Som ett första steg kan utsläppsdatan medelvärdas i ett område kring trajektorian som växer med avståndet till receptorpunkten; ju längre trajektorian färdats desto större blir osäkerheten och därmed området över vilket man medelvärdar. Denna typ av medelvärdering görs i både *EStRaX* och *HY-ESX*, men stora skillnad kvarstår uppenbarligen.

En bättre typ av medelvärdering skulle vara att generera en mängd trajektorier, från något varierande startpunkt kring den intressanta punkten, och sedan medelvärdera över dem. ESX-modellen har däremot inte i sig stöd för multipla trajektorier och därför skulle man i så fall behöva göra en mängd körningar och sedan medelvärdera resultaten själv. Det här skulle vara en väldigt tidskrävande process. Om man istället hade tillgång till programvara som hade stöd för multipla trajektorier skulle detta underlätta men också kräva en betydande mängd datorkraft för att kunna fungera.

10.6 Osäkerhet i meteorologisk data

Hur väl en trajektoria stämmer överens med hur ett luftpaket färdats vid den aktuella tidpunkten är beroende av hur verklighetstrogen den meteorologiska datan är. Eftersom mät-

stationer inte förekommer med bestämda intervall över jordens yta, och dessutom är relativt sällsynta, är majoriteten av datan hämtad från ECMWF beräknad och inte uppmätt. Detta leder naturligtvis till en osäkerhet redan initialt, även om ECMWF:s modeller säkerligen är välutvecklade. Eftersom de trajektorier som beräknats i projektet alla är beräknade med hjälp av data från ECMWF bidrar det här till det totala osäkerhetsmomentet.

Referenser

- [1] Jes Fenger. Air pollution in the last 50 years - from local to global. *Athmospheric Environment*, 43:13–22, 2009.
- [2] Malin Gustafsson, Bertil Forsberg, Hans Orru, Stefan Åström, Haben Tekie, and Karin Sjöberg. Quantification of population exposure to no₂, pm_{2.5} and pm₁₀ and estimated health impacts in sweden 2010. *IVL Report B 2197*, 2010.
- [3] Kristina Lindgärde. Hälften av dieselsorterna fastnar i lungorna. http://www4.lu.se/o.o.i.s?id=31326&news_item=8334, 2012-06-20, Informationen hämtad 2015-03-10.
- [4] Per Erik Karlsson and Annika Svensson. Nära marken. <http://www.forskning.se/nyheterfakta/teman/ozon/naramarken.4.303f5325112d733769280004163.html>, 2003, Informationen hämtad 2015-03-16.
- [5] Ronald B. Stull. An introduction to boundary layer meteorology. 2003.
- [6] D. M. Whelpdale. Particulate concentration and dry deposition measurements. *Journal of Great Lakes Research*, 1976.
- [7] David Fowler. Ground-level ozone in the 21st century: future trends, impacts and policy implications. Oktober 2008.
- [8] G. A. Sehmel. Dry deposition velocities, Mars 1984.
- [9] E. H. Runge W. A. H. Asman R. Berkowicz och M. F. Hovmand O. Hertel, J. Christensen. Development and testing of a new variable scale air pollution model - acdep.
- [10] A. C. Chamberlain och R. C. Chadwick. Transport of iodine from atmosphere to ground, Juli 1965.
- [11] Y. Izumi och E. F. Bradley J. A. Businger, J. C. Wyngaard. Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer. 1971.
- [12] Kenneth P. Bowman, John C. Lin, Andreas Stohl, Roland Draxler, Paul Konopka, Arlyn Andrews, and Dominik Brunner. Input data requirements for lagrangian trajectory models. *Input Data Requirements Lagrangian Trajectory Models*, 94:1051–1058, 2012.
- [13] Roland R. Draxler and G.D Hess. An overview of the hysplit_4 modelling system for trajectories, dispersion, and deposition. *Australian Meteorological Magazine*, 47:295–308, 1998.
- [14] A. Stohl, C. Forster, A. Frank, P. Seibert, and G. Wotawa. Technical note: The lagrangian particle dispersion model flexpart version 6.2. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5:24612474, 2005.
- [15] Roland R. Draxler and G.D Hess. Description of the hysplit_4 modeling system. 1997.

- [16] ECMWF. European centre for medium-range weather forecasts (ecmwf). <http://www.ecmwf.int>, Informationen hämtad 2015-04-16.
- [17] David Simpson. Atmospheric transport and deposition of reactive nitrogen in Europe. pages 298–316, 2011.
- [18] Sanford Sillman, Jennifer A. Logan, and Steven C. Wofsy. The sensitivity of ozone to nitrogen oxides and hydrocarbons in regional ozone episodes. 1990-02-20.
- [19] P Grennfelt and J. Schjoldager. Photochemical oxidants in the troposphere: A mounting menace. *Ambio*, 1984.
- [20] R G Derwent and M E Jenkin. Hydrocarbons and the long range transport of ozone and pan across europe. Maj 1990.
- [21] Michael E. Jenkin and Kevin C. Clemitshaw. Ozone and other secondary photochemical pollutants: chemical processes governing their formation in the planetary boundary layer. 15 Oktober 1999.
- [22] David Simpson, Almut Arneth, Gina Mills, Sverre Solberg, and Johan Uddling. Ozone - the persistent menace: interactions with the n cycle and climate change. 2014.
- [23] L.K. Xue, T. Wang, J. Gao, A.J. Ding, X.H. Zhou, D.R. Blake, X.F. Wang, S.M. Saunders, S.J. Fan, H.C. Zuo, Q.Z. Zhang, and W.X. Wang. Ground-level ozone in four chinese cities: precursors, regional transport and heterogeneous processes. 2014-12-10.
- [24] Paul J. Crutzen, Mark G. Lawrence, and Ulrich Pöschl. On the background photochemistry of tropospheric ozone. 4 september 1998.
- [25] David Simpson. Long-period modelling of photochemical oxidants in europe. model calculations for july 1985. 29 November 1991.
- [26] D. Fowler, J.N. Cape, M. Coyle, R.I. Smith, A.-G. Hjellbrekke, D. Simpson, R.G. Derwent, and C.E. Johnson. Modelling photochemical oxidant formation, transport, deposition and exposure of terrestrial ecosystems. 22 Maj 1999.
- [27] A. Eliassen, Ø. Hov, I. Isaksen, J. Saltbones, and F. Stordal. A lagrangian long-range transport model with atmospheric boundary layer chemistry. *Institute of Geophysics*, 1982.
- [28] Umesh Kulshrestha and Bablu Kumar. Airmass trajectories and long range transport of pollutants: Review of wet deposition scenario in south asia. 2014-08-12.
- [29] D. Simpson och J.-P. Tuovinen. Towards a flexible 1-d modelling system for biosphere-atmosphere exchange: the ecosystem surface exchange (esx) model, April 2015.
- [30] Centre on Emission Inventories and Projections. http://www.ceip.at/ms/ceip_home1/ceip_home/ceip_unece/, Information hämtad 2015-05-05.

- [31] D. Simpson, A. Benedictow, H. Berge, R. Bergström, L. D. Emberson, H. Fagerli, C. R. Flechard, G. D. Hayman, M. Gauss, J. E. Jonson, M. E. Jenkin, A. Nyíri, C. Richter, V. S. Semeena, S. Tsyro, J.-P. Tuovinen, Á . Valdebenito, , and P. Wind. The emep msc-w chemical transport model technical description. 2012.
- [32] S.-E. Gryning och E. Batchvarova. *Air Pollution Modeling and Its Application XIII*. Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000.
- [33] Bretherton. <http://http://www.atmos.washington.edu/academics/classes/2013Q2/547/lect6.pdf>, Information hämtad 2015-05-18.
- [34] Statistiska Centralbyrån. Markanvändningen i världen. http://www.scb.se/Statistik/_Publikationer/MI0803_2010A01B_BR_04_MI03BR1301.pdf, 2010, Informationen hämtad 2015-04-10.
- [35] Cygwin Overview. <https://cygwin.com/cygwin-ug-net/cygwin-ug-net.pdf>, Information hämtad 2015-05-10.
- [36] Minimalist GNU for Windows MinGW. <http://www.mingw.org/>, Information hämtad 2015-05-10.
- [37] Python-about. <https://www.python.org/about/>, Informationen hämtad 2015-05-06.
- [38] Python-wiki. http://en.wikipedia.org/wiki/Python_%28programming_language%29, Informationen hämtad 2015-05-06.
- [39] Python-jämförelse. <https://www.python.org/doc/essays/comparisons/>, Informationen hämtad 2015-05-06.
- [40] Netcdf. <http://en.wikipedia.org/wiki/NetCDF>, Informationen hämtad 2015-04-21.
- [41] Grib. <http://en.wikipedia.org/wiki/GRIB>, Informationen hämtad 2015-04-26.
- [42] ARL. Air resources laboratory (arl). <http://www.arl.noaa.gov/index.php>, Informationen hämtad 2015-04-25.

A Användarmanual

I detta projekt har det utvecklats programkod för att hantera data, beräkna trajektorier och köra modeller. Dessa finns tillgängliga via Github på adressen

<https://github.com/farpoke/EStraX>

I detta Git-projekt ingår kod för att arbeta med ESX-modellen, ECMWF data och trajektorier, men inte källkoden till ESX eller HYSPLIT. HYSPLIT-koden går att få tillgång till genom att kontakta ARL som utvecklat HYSPLIT [42].

A.1 Introduktion

Länken till EStrax ovan innehåller en "README.md" fil som försöker ge en introduktion och hjälp till att börja använda ESX, EStrax och HYSPLIT.

A.2 HY-ESX

Nedan följer en kort instruktionslista för den modell som baseras på trajektorier från HYSPLIT.

1. Placera scripten från mappen `data_to_esx` i samma mapp.
2. Ladda ner meteorologisk data i filformatet `.grib` från ECMWF. Du väljer själv tidpunkt, men all data från tabell 1 måste åtminstone finnas med.
3. Konvertera datan och generera sedan en önskad trajektoria med hjälp av HYSPLIT enligt avsnitt 5.1. Spara sedan filen med utdata från HYSPLIT (om inget annat anges sparas denna fil som `tdump`).
4. I scriptet `read_hysplit_data.py` anger Du sökvägen till ovanstående fil.
5. I scriptet `data_main.py` anger Du sökvägen till önskade utsläppsfiler. Dessutom behöver sökvägen till en fil innehållande underlagstyp som funktion av position på jorden anges här. Den fil vi har använt oss av har erhållits från EMEP.
6. I scriptet `write_to_csv.py` anger Du var du vill att CSV-filen med indata till ESX ska hamna. Förslagsvis i samma mapp som config-filerna för ESX ligger.
7. Kör skriptet `data_main.py`.
8. Kör sedan ESX, antingen manuellt eller med modulen `pyesx` från `EStraX`

A.3 EStrax

EStraX består av fyra olika Python-paket:

pyesx som innehåller kod som hjälper vid konfiguration och körning av ESX.

ecmwf som innehåller kod för att hantera och läsa från ECMWF data i netCDF format.

trajlib som innehåller kod för att beräkna trajektorier på ett mycket flexibelt sätt.

plotting som innehåller kod som hjälper med att rita ut figurer för trajektorier och annan geografisk data.

Mer information finns i Git-projektet.