



Centrum pro výzkum
toxických látek
v prostředí

Modely atmosférického transportu chemických látek

Přednáška

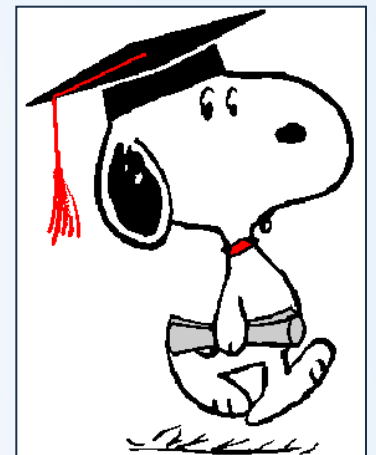
Alice Dvorská



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Inovace a rozšíření výuky zaměřené na problematiku životního prostředí na PřF MU (CZ.1.07/2.2.00/15.0213)
spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky

Obsah přednášky



Přehled přednášky

- Co je to atmosférický transport?
- Proč modelovat atmosférický transport?
- Modely atmosférického transportu chemických látek
- Trajektorie vzduchových mas
- Receptorové modely



1. Co je to atmosférický transport



Atmosférický transport

Transport látek v jednotlivých složkách prostředí a mezi nimi je jedním z hlavních aspektů osudu látek v prostředí.

Stejně jako celý osud látek v životním prostředí závisí nejen na vlastnostech prostředí, ale i látek (fyzikálně-chemické vlastnosti) a je řízen fyzikálními zákony.

Osud a transport látek v prostředí lze studovat pomocí environmentálních modelů.

Atmosféra je spolu s mořskými proudy hlavním médiem dálkového transportu látek.

více viz Holoubek I.: Chemie životního prostředí I

Kontext atmosférického transportu



Procesy - atmosférická difuze

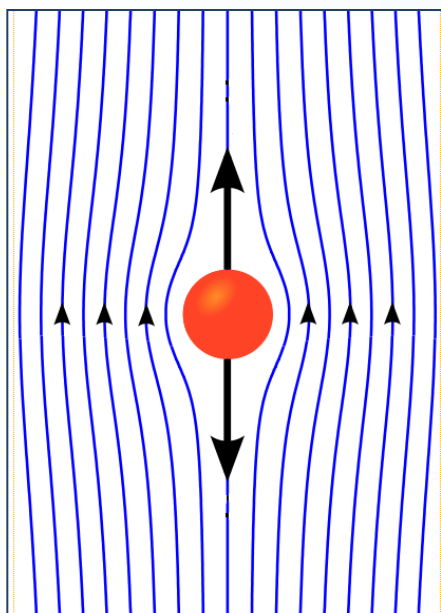
Základním aspektem studia chování stopových látek v atmosféře je potřeba matematicky popsat distribuci polutantů emitovaných do atmosféry v prostoru a čase. Proto musíme umět popsat atmosférickou difuzi.

Chování plynů a částic v turbulentním proudění se nazývá turbulentní „difuzí“, v našem případě atmosférickou „difuzí“.

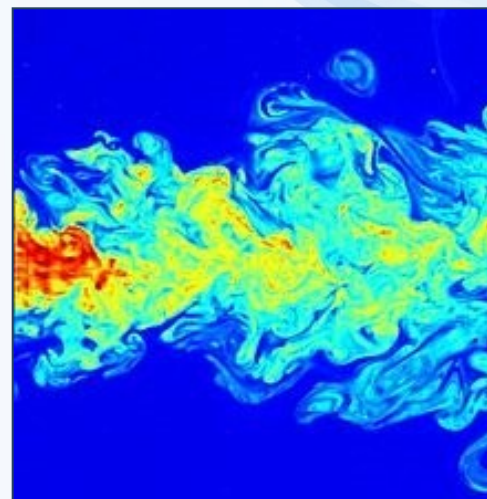
Procesy zodpovědné za šíření plynů a částic v turbulentním proudění však nejsou stejné jako u běžné molekulární difuze, proto se atmosférické „difuzi“ často říká také atmosférická disperze.

Charakteristika atmosférického proudění

Atmosférické proudění není laminární (tj. nemísící se s rovnoběžnými proudnicemi), **nýbrž turbulentní** (proudnice se navzájem promíchávají). Turbulence je tedy charakteristikou proudění a ne tekutin jako takových.



Laminární proudění



Turbulentní proudění

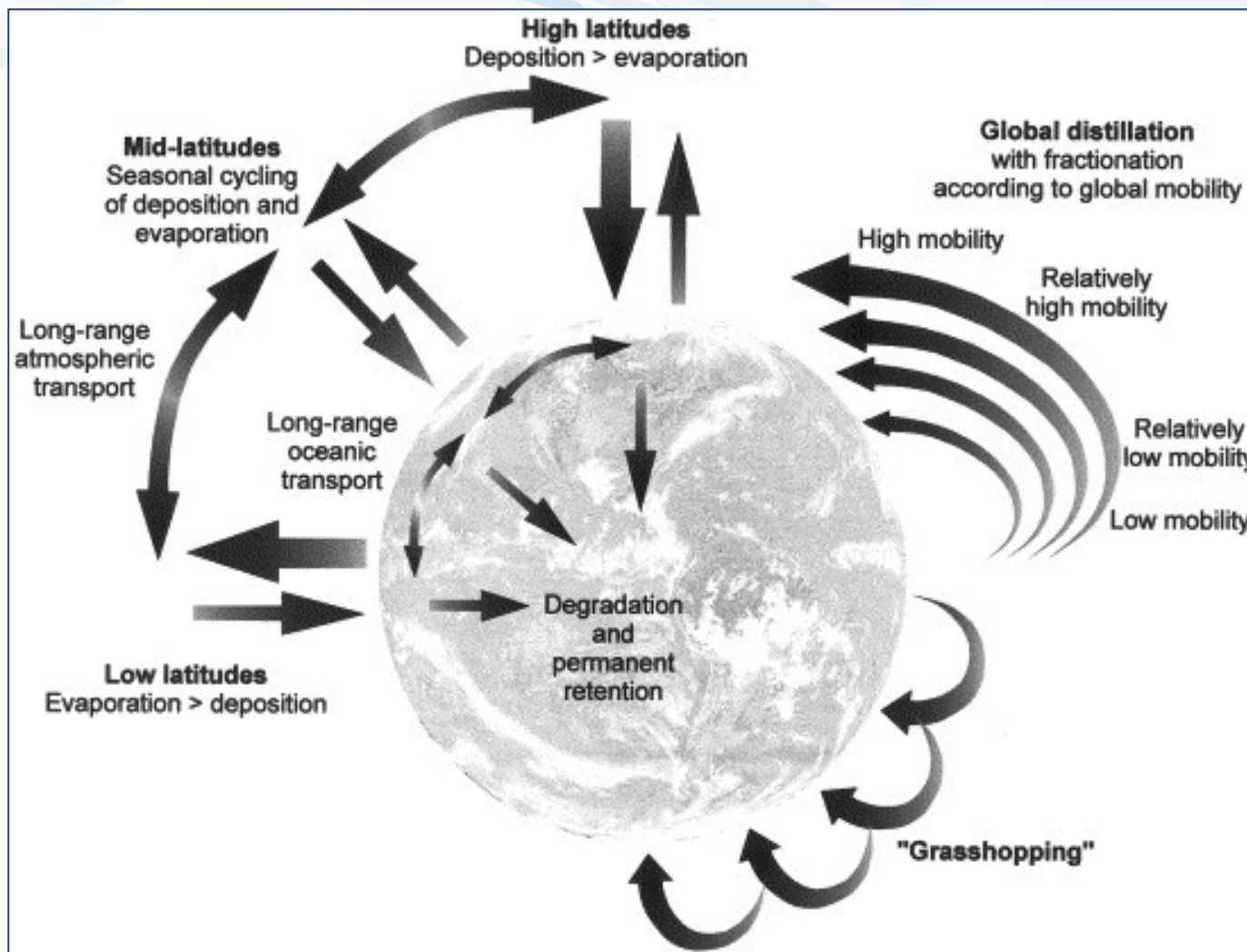


Charakteristika atmosférického proudění

Turbulentní proudění je nepravidelné a náhodné, složky rychlosti se v libovolném místě náhodně mění v čase. Rychlosti proudění jsou tedy náhodnými proměnnými, a proto nelze predikovat jejich přesné hodnoty. Rovnice mechaniky tekutin pro atmosféru tedy nelze vyřešit exaktně, musíme si pomoci určením statistických vlastností proměnných (rychlostí a teplot tekutin).

Příčinou turbulence atmosférického proudění je obvykle tření.

Osud POPs v prostředí



Dálkový transport

Potenciál látek pro dálkový atmosférický transport:

- vyplývá z interakcí mezi látkou a prostředím, proto je variabilní v čase, prostoru a v závislosti na způsobu vstupu látky do prostředí
- kvalitativně se dokazuje detekcí polutantů v odlehlých oblastech
- kvantifikuje se pomocí empirických dat nebo multicompartment modelování

Jednou z charakteristik popisujících potenciál látek pro dálkový transport je Characteristic travel distance (CTD)

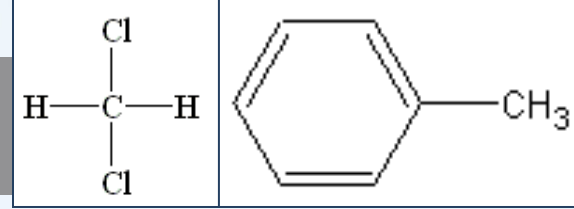
Je to vzdálenost od zdroje, kde je koncentrace látky snížena o 63% při předpokladu kontinuálních emisí na zdroji

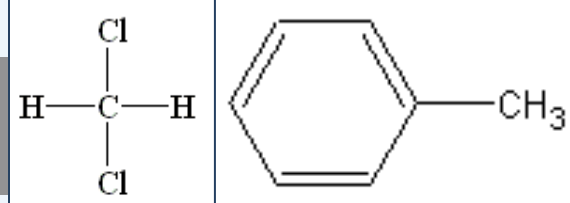
POP	CTD (km)
Hexachlorbenzen	110 000
PCB (tetra homolog)	8900
p,p'-DDE	2800
Toxafen	2500
PCB (hepta homolog)	1900
Chlordan	1000
p,p'-DDT	830
2,3,7,8-TCDD	810
Aldrin	100

2. Proč modelovat atmosférický transport



Průmyslové oblasti





Journal of Environmental Science and Health Part A (2010) 45, 527–533
Copyright © Taylor & Francis Group, LLC
ISSN: 1093-4529 (Print); 1532-4117 (Online)
DOI: 10.1080/10934521003594954



Comparison of observed and estimated concentrations of volatile organic compounds using a Gaussian dispersion model in the vicinity of factories: An estimation approach to determine annual average concentrations and human health risks

YUICHI MIYAKE¹, TAKESHI KOBAYASHI^{1,2}, KOSUKE INABA³, IZUMI WATABE², NAHO KASUYA² and TAKASHI KAMEYA²

¹*Center for Risk Management and Safety Sciences, Yokohama National University, Yokohama, Japan*

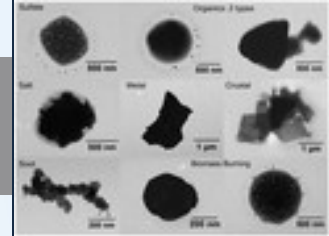
²*Graduate School of Environment and Information Sciences, Yokohama National University, Yokohama, Japan*

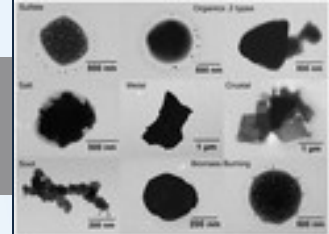
³*Faculty of Engineering, Yokohama National University, Yokohama, Japan*

the Air Quality Guidelines for Europe, second edition, were measured in the vicinity of factories (270 and 470 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ for toluene and 510 and 660 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ for dichloromethane). Toluene and dichloromethane may have some adverse health effects on the local



Jihovýchodní Asie





ELSEVIER

Contents lists available at [ScienceDirect](#)

Atmospheric Environment

journal homepage: www.elsevier.com/locate/atmosenv



Aerosol transport model evaluation of an extreme smoke episode in Southeast Asia

Edward J. Hyer^{a,*}, Boon Ning Chew^b

^a UCAR Visiting Scientist, Naval Research Laboratory, 7 Grace Hopper Avenue, Stop 2, Monterey, CA 93940, USA

^b Centre for Remote Imaging, Sensing and Processing, National University of Singapore, Singapore

ARTICLE INFO

Article history:

Received 31 August 2009

Received in revised form

24 January 2010

Accepted 29 January 2010

Keywords:

Biomass burning

Fire

Malaysia

Indonesia

Singapore

Aerosol

Aerosol transport modeling

Aerosol modeling

Emissions modeling

Smoke

Smoke emissions

Sumatra

ABSTRACT

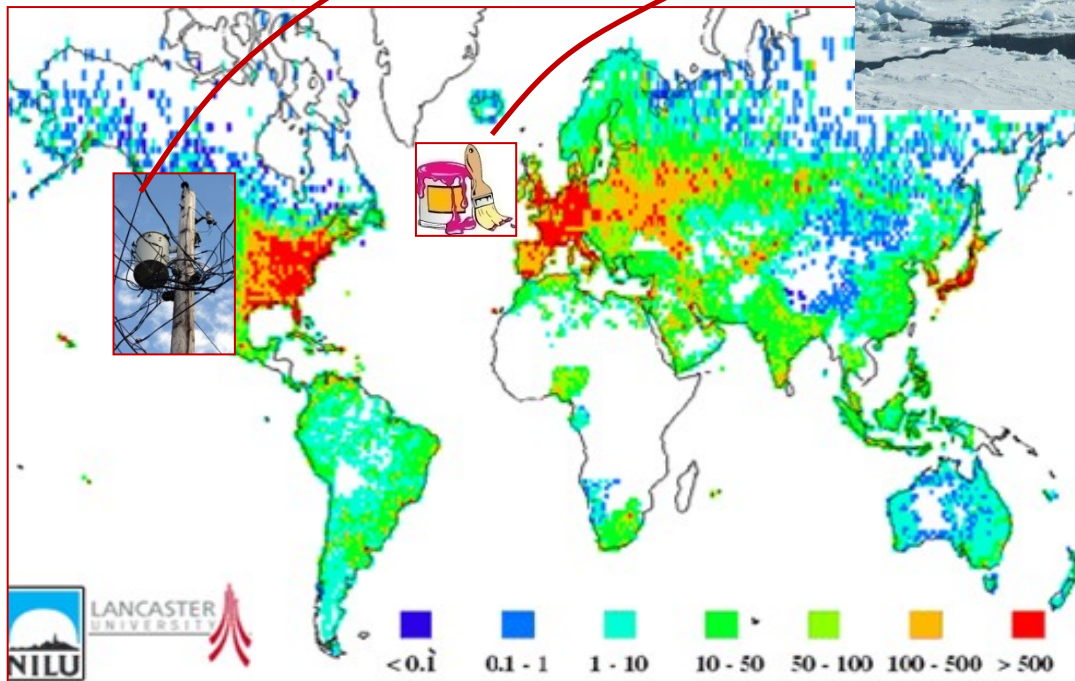
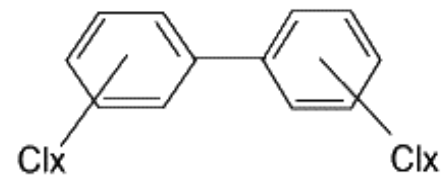
model of biomass burning emissions and the NAAPS model of aerosol transport and evolution to simulate these events, and compare our simulation results to 24-h average PM₁₀ measurements from 54 stations in

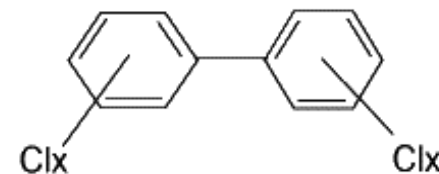
the bias in the smoke aerosol flux was determined to be a factor of between 2.5 and 10, and an overall factor of 3.5 was estimated. After application of this factor, the simulated smoke aerosol concentration averaged

© 2010 Elsevier Ltd. All rights reserved.



Arktida





Atmos. Chem. Phys., 7, 4015–4025, 2007
 www.atmos-chem-phys.net/7/4015/2007/
 © Author(s) 2007. This work is licensed
 under a Creative Commons License.



Atmospheric
 Chemistry
 and Physics

GEM/POPs: a global 3-D dynamic model for semi-volatile persistent organic pollutants – Part 2: Global transports and budgets of PCBs

P. Huang¹, S. L. Gong^{1,2}, T. L. Zhao², L. Neary³, and L. A. Barrie⁴

¹Air Quality Research Division, Science & Technology Branch, Environment Canada, 4905 Dufferin Street, Toronto, Ontario M3H 5T4, Canada

²Dept. of Chemical Engineering and Applied Chemistry, University of Toronto, 200 College Street, Toronto, Ontario, Canada, M5S 3E5, Canada

³Dept. of Earth and Space Science and Engineering, York University, 4700 Keele Street, Toronto, Ontario, M3J 1P3, Canada

⁴Atmospheric Research and Environment Program, World Meteorological Organization, 7 bis, avenue de la Paix, BP2300, 1211 Geneva 2, Switzerland

Received: 19 January 2007 – Published in Atmos. Chem. Phys. Discuss.: 16 March 2007

Revised: 2 July 2007 – Accepted: 24 July 2007 – Published: 1 August 2007

1 Introduction

... were identified for PCB transports in the atmosphere with a transport flux peaking below 8 km for gaseous and 14 km for particulate PCB28, and peaking below 4 km for gaseous and 6 km for particulate PCB180. The inter-continental transports of PCBs in the Northern Hemisphere (NH) are dominated in the zonal direction with their route changes regu-

(Wania, 2003). POPs vary greatly in properties such as vapour pressure, solubility in water, and reactivity, thus their transport and deposition in the environment depends on the unique combination of persistence and partitioning, which

... PCBs originated from the regions of Europe, Asia and North



Proč tedy modelovat atmosférický transport?

Modely atmosférického transportu aplikujeme za účelem:

- určení zdroje znečištění
- bližšího popisu (kvalitativního i kvantitativního) zdroje znečištění
- podpory při tvorbě emisních inventur
- studia vlivu zdroje znečištění na okolí
- předpovídání (predikce) koncentrací látek v zájmových oblastech
- odhadu expozičních koncentrací v zájmových oblastech (kvantifikace expozice)
- studia vlivu změn na zdroji na (expoziční) koncentrace v zájmových oblastech
- popisu vlivu dálkového transportu na zjištěné koncentrace látek
- studia osudu látek v prostředí
- a dalšími účely dle povahy studie...

Aplikace některých modelů je povinná, např. provedení rozptylové studie v rámci procesu EIA.

3. Modely atmosférického transportu



Modely atmosférického transportu

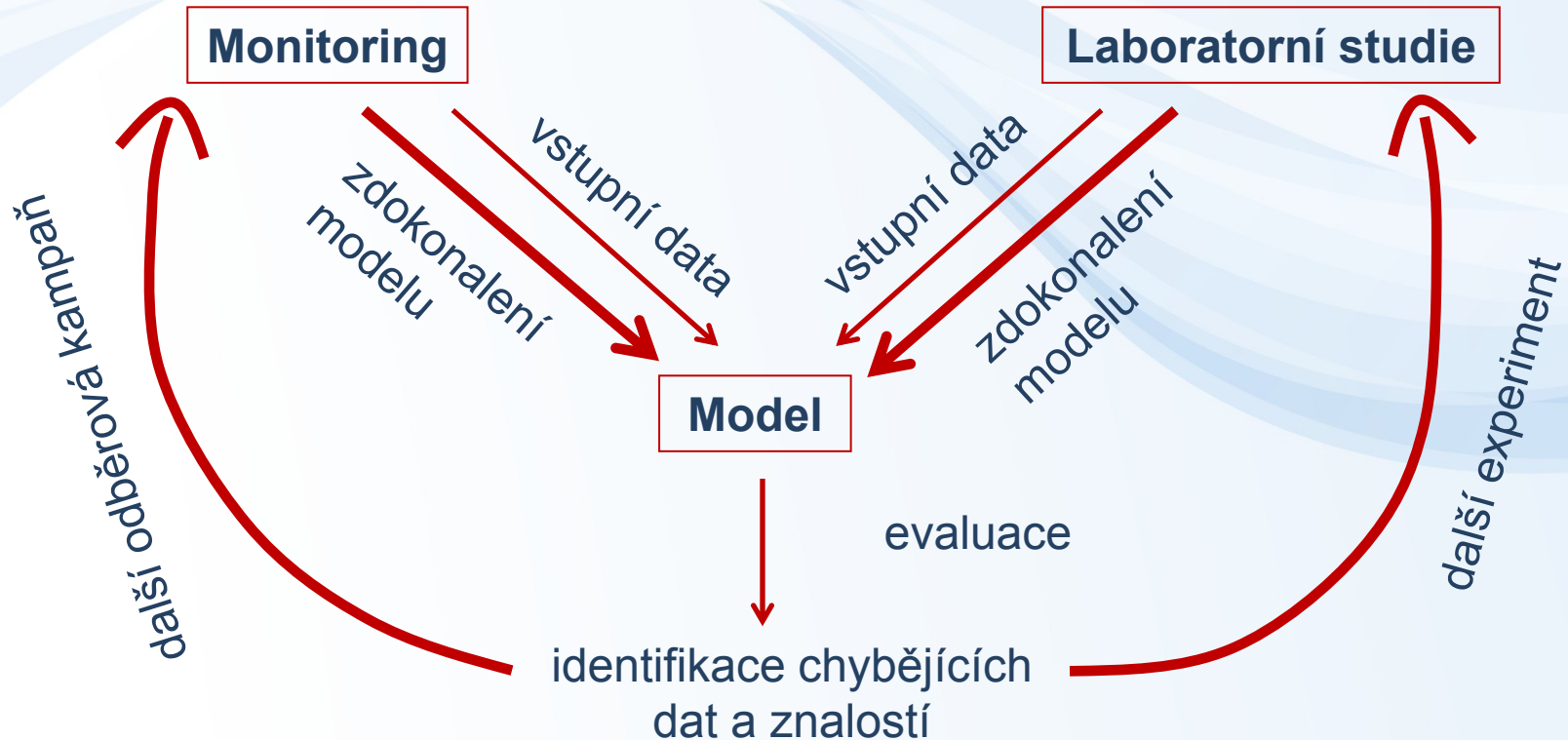
Měření v terénu poskytují pouze dílčí krátkodobou informaci o stavu atmosféry v daném čase a místě. Bez koncepčních modelů je jejich interpretace složitá.

Modely také integrují naše znalosti o jednotlivých procesech v atmosféře do celkového obrazu o stavu atmosféry a faktorech, které jej ovlivňují.

Pro řešení problematiky znečištění ovzduší je nutné **určení kvantitativních vztahů mezi kvalitou venkovního vzduchu a zdroji polutantů (emisemi).**

Tyto vztahy jsou studovány pomocí modelů zahrnujících popis emisí, meteorologie, transformace látek v atmosféře a vymývání.

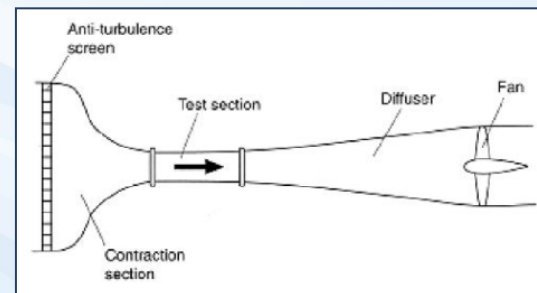
Kontext modelování atmosférického transportu látek



Model atmosférického transportu je nástrojem pro koncepční náhled na danou problematiku, je ve stálé interakci s monitoringem (poskytuje popis stavu atmosféry a data pro evaluaci modelu) a laboratorními studiemi (studují konkrétní procesy v atmosféře).

Základní dělení modelů atmosférického transportu látek

Fyzikální, které simulují procesy v atmosféře ve zmenšeném měřítku (např. aerodynamické tunely)



Matematické, založené na

statistické analýze dat

popisu fyzikálních a chemických procesů v atmosféře

- další dělení dle
- způsobu popisu turbulentní atmosférické difuze
 - dimenzionality
 - měřítka
 - vnímání času

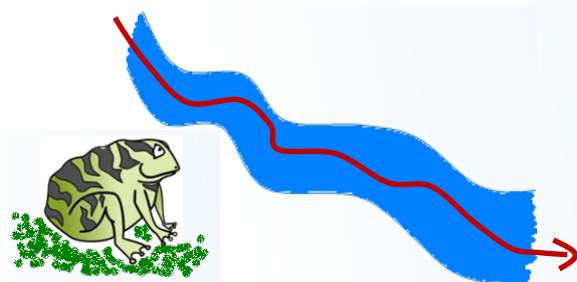


Dělení modelů podle popisu turbulentní atmosférické difuze

Existují dva základní přístupy k popisu turbulentní atmosférické difuze:

Eulerovské

Chování látek je popsáno vzhledem k pevně danému systému souřadnic.



Lagrangeovské

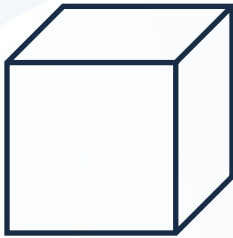
Chování látek je popsáno vzhledem k pohybující se tekutině.



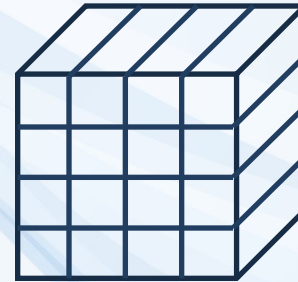
Matematické vztahy popisující koncentraci látek v daném místě a čase se u obou přístupů liší. Mezi studovanou vzduchovou masou (kterou představuje box) a jejím okolím k výměně látek:

- nedochází, látky do ní vstupují pouze ze zemského povrchu (Lagrang. modely)
- dochází, látky vstupují a vystupují stěnami boxu (Euler. modely)

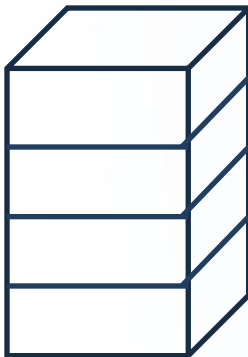
Dělení modelů podle dimenzionality



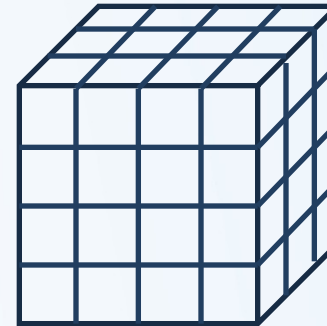
Box model (0D) – koncentrace látek jsou v celém boxu homogenní, jsou funkcí času



2D model – koncentrace látky jsou funkcí dvou prostorových os a času



Sloupcový model (1D) – koncentrace látky je funkcí výšky a času



3D model – koncentrace látky jsou funkcí tří prostorových os a času

Dělení modelů dle měřítka a velikosti zájmové oblasti

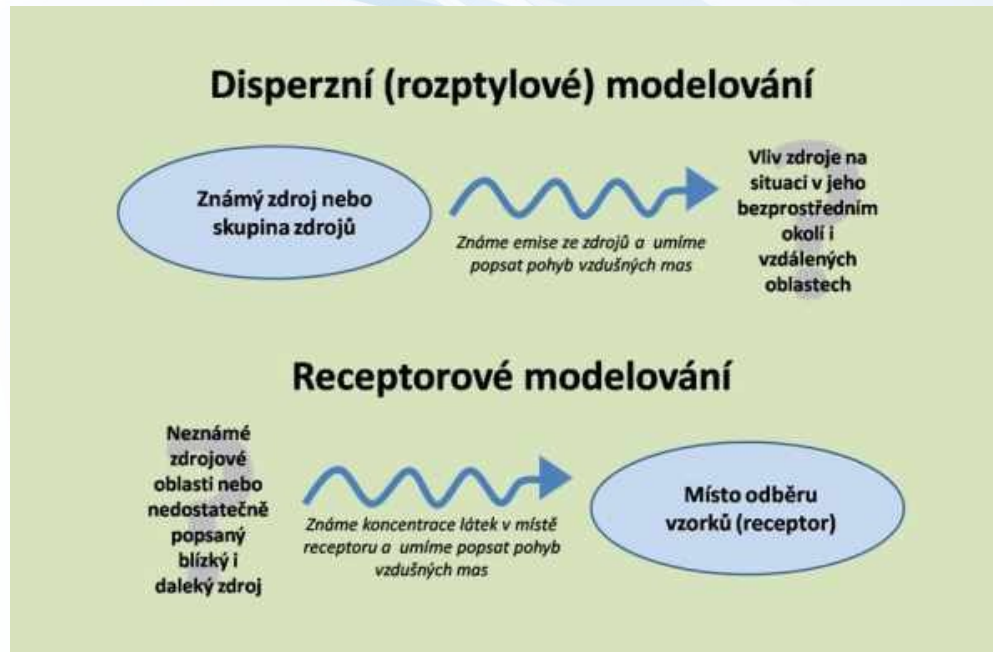
Model	Typická velikost modelované oblasti	Typické rozlišení
Mikroměřítko	200 × 200 × 100 m	5 m
Městský	100 × 100 × 5 km	4 km
Regionální	1000 × 1000 × 10 km	20 km
Synoptický (kontinentální)	3000 × 3000 × 20 km	80 km
Globální	65 000 × 65 000 × 20 km	5° × 5°

Seinfeld a Pandis, 2006

Modely popisují procesy v třírozměrném prostoru (viz typická velikost modelované oblasti), výsledky poskytují ve formě hodnot pro každou buňku pravidelné mřížky, která pokrývá modelovanou oblast (viz typické rozlišení).



Dělení modelů podle vnímání času



Receptorové modely kombinují modelovaný pohyb vzdušných mas zpětně v čase s koncentracemi polutantů naměřenými v místě odběru vzorků (receptoru - příjemci).

Rozptylové (disperzní) modely se zaměřují na transport látek od známého zdroje, zředování koncentrace během transportu a predikci koncentrací látek v zájmových oblastech.



Obecný postup při modelování atmosférického transportu látek

Nejdůležitějšími kroky při designu modelu, jeho aplikaci a testování jsou:

- Definice cílů modelování
- Výběr vhodného modelu, algoritmů
- Získání vstupních a emisních dat
- Srovnání predikovaných hodnot s reálnými daty
- Analýza výsledků

U výpočetně náročnějších modelů je třeba pečlivě zvážit výběr výpočetní techniky.

Nedostatky modelů atmosférického transportu

- Modely založené na statistické analýze dat nepopisují kauzální (příčinné) vztahy, jejich závěry tedy platí jen pro studovaný soubor dat (vždy popisují minulý stav). Nejsou tedy vhodné pro predikce budoucích situací (např. vliv změny v emisích znečišťujících látek na kvalitu ovzduší).
- Trajektorie vzduchových mas (na jejichž vyhodnocení stojí řada modelů založených na popisu fyzikálních a chemických procesů v atmosféře) jsou samy výstupem z modelu a tedy zatížené různými nejistotami
- Rozptylové modely jsou závislé na kvalitě emisních inventur, obvykle neberou v potaz sekundární zdroje
- Často je problematické určit statistickou významnost výstupů z modelů
- Model vždy vychází z předpokladů, které zjednodušují skutečnost (např. je zanedbána turbulentní difuze polutantů nebo vymývací procesy)

Je-li to možné, doporučuje se na studovanou situaci aplikovat alespoň dva modely a výsledky porovnat.

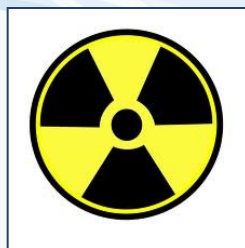
4. Trajektorie vzduchových mas



Trajektorie vzduchových mas



Černobyl
1986



Fukušima
2011



Trajektorie vzduchových mas

Trajektorie = dráha imaginární ohraničené vzduchové masy (tj. boxu nebo nekonečně malé krychle) pohybující se závislosti na větru

- **předná trajektorie:** zdroj → ?
- **zpětná trajektorie:** ? → receptor

Existují různé výpočetní metody, všechny vyžadují jako vstup meteorologická data generovaná v pravidelných časových intervalech.

Vertikální souřadnici v rovnicích atmosférické dynamiky nepředstavuje zeměpisná výška, nýbrž hladiny charakterizované konstantní hodnotou vybrané veličiny.

Typ trajektorie	Konstantní veličina pro výpočet vertikální souřadnice	Vertikální pohyb vzduchu
Isobarické	Tlak	Zanedbaný
Isoeta	Souřadnice kopírující terén	Zanedbaný
Isentropické	Potenciální teplota	Předpokládá se adiabatický
Třírozměrné	Modelované rychlosti větru	Zahrnutý

Základní rovnice trajektorie

Trajektorie je série bodů v prostoru a čase definovaná dle rovnice:

$$\frac{dX}{dt} = \dot{X} [X(t)]$$

kde t je čas, X je vektor polohy a \dot{X} vektor rychlosti vzduchové masy (parcely).
Známe-li výchozí polohu X_0 vzduchové parcely v čase t_0 , pak lze vypočítat zpětnou trajektorii dle rovnice:

$$X(t) = X(X_0, t)$$

pro výpočet polohy částice v čase t . Pokud známe pozici X částice v čase t , lze pomocí zpětné trajektorie, tj. inverzní transformací rovnice:

$$X_0(t_0) = X_0(X, t)$$


vypočítat počáteční polohy vzduchové parcely.

Přesnost výpočtu trajektorie je limitována časovým a prostorovým rozlišením vstupních dat, chybami v měření vstupních dat a analýze a zjednodušujícími předpoklady v modelu.

Analýza velkých souborů trajektorií kompenzuje chyby ve výpočtu jednotlivých trajektorií.

Modely pro výpočet trajektorií vzduchových mas

HYSPLIT (nejpoužívanější, uživatelsky velmi příjemný, umožňuje výpočet trajektorií on-line i off-line): <http://www.arl.noaa.gov/ready/hysplit4.html>




ARL
Air Resources Laboratory
Conducting research and development in the fields of air quality, atmospheric dispersion, climate, and boundary layer

Enter search term(s)
 ARL site only All NOAA
[Advanced Search](#)

- ▣ ARL Home
- ▣ HYSPLIT Model
- ▣ READY
 - READY News
 - Transport & Dispersion
 - [Get Run HYSPLIT >>](#)
 - Volcanic Ash
 - Transfer Coefficient Matrix for Fukushima Daiichi
 - Short-Range Ensemble Dispersion Forecasts
 - Gaussian Plume Model
 - Balloon Flight Forecasting Tools
 - Current & Forecast Meteorology
 - North America
 - Archived Meteorology
 - North America
 - Air Quality
 - U.S Trajectories

HYSPLIT - Hybrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model
The HYSPLIT model can be run interactively on the READY web site or installed on a PC (Mac) and run using a graphical user interface (GUI).



HYSPLIT-WEB (Internet-based)

- [Run HYSPLIT Trajectory Model](#)
- [Run HYSPLIT Dispersion Model](#)
- [Run HYSPLIT for Volcanic Ash](#)
- [Spain HYSPLIT .m](#)
- [HYSPLIT for National Weather Service Forecast Offices \(NOAA employees only\)](#)

PC Windows-based HYSPLIT

- [Download Public \(unregistered\) Version](#)
- [Download Registered Version \(registration required\)](#)
- [Graphical Utilities](#)
- [Meteorological Data Conversion Utilities](#)

HYSPLIT-compatible Meteorological Data

- [NOAA ARL Archived Data](#)
- [NOAA NCEP Forecast Data Operational FTP Server](#)
- [NOAA ARL Forecast Data FTP Server](#)

TRAMPER: <http://www.geo.fu-berlin.de/met/ag/trumpf/Trajektorien/index.html>

FLEXTRA: <http://zardoz.nilu.no/~andreas/flextra+flexpart.html>

existují další modely používané spíše na úrovni jednotlivých institucí

Vstupní parametry pro výpočet trajektorií

Pro výpočet trajektorií je třeba si rozmyslet tyto vstupní parametry:

- směr trajektorií (předné nebo zpětné)
- typ trajektorií (isobarické, isentropické, 3D apod)
- počáteční čas trajektorie (pozor: často v UTC – Coordinated Universal Time)
- délku trajektorie (v hodinách)
- zeměpisné souřadnice počátečního bodu (pozor: jižní zeměpisné šířky a západní délky se často značí pomocí znaménka „-“)
- počáteční výšku (pozor: rozlišujeme AGL – Above Ground Level a AMSL – Above Mean Sea Level)
- v případě, že počítáme více trajektorií pro delší časový interval, potřebujeme si rozmyslet časové intervaly mezi po sobě následujícími trajektoriemi
- doprovodná meteorologická data, pokud je potřebujeme

Upravený výstup z modelu HYSPLIT

povinné údaje

ČÍSLO TRAJ	ROK	MĚSÍC	DEN	HOD	HOD ZPĚT	ŠÍRKA	DĚLKA	VÝŠKA	TLAK	T	DĚŠT
1	4	4	1	4	0.0	49.580	15.050	500.0	905.2	276.2	0.0
1	4	4	1	3	-1.0	49.461	15.422	497.9	906.0	276.4	0.0
1	4	4	1	2	-2.0	49.325	15.767	490.4	907.5	276.7	0.0
1	4	4	1	1	-3.0	49.174	16.075	479.3	910.0	277.2	0.0
1	4	4	1	0	-4.0	49.008	16.339	469.2	913.3	277.6	0.0
1	4	3	31	23	-5.0	48.830	16.574	459.3	917.3	278.0	0.0
1	4	3	31	22	-6.0	48.642	16.794	453.4	921.8	278.4	0.0
1	4	3	31	21	-7.0	48.444	17.003	456.2	926.8	278.7	0.0
1	4	3	31	20	-8.0	48.233	17.203	464.9	931.9	279.1	0.0
1	4	3	31	19	-9.0	48.011	17.397	483.3	931.7	279.3	0.0
1	4	3	31	18	-10.0	47.786	17.584	510.8	930.9	279.6	0.0
1	4	3	31	17	-11.0	47.559	17.767	545.7	931.1	279.7	0.0
1	4	3	31	16	-12.0	47.341	17.945	579.5	928.5	279.7	0.0
1	4	3	31	15	-13.0	47.141	18.118	607.2	927.2	279.6	0.0
1	4	3	31	14	-14.0	46.956	18.289	629.7	926.3	279.6	0.0
1	4	3	31	13	-15.0	46.783	18.454	646.1	925.6	279.5	0.0
1	4	3	31	12	-16.0	46.618	18.613	658.5	925.5	279.4	0.0
1	4	3	31	11	-17.0	46.456	18.779	664.6	925.6	279.3	0.0

volitelné parametry

Zpětná trajektorie začíná v observatoři Košetice dne 1.4.2004 ve 4 hod ráno a ve výšce 500m, je dlouhá 17 hodin zpětně v čase.

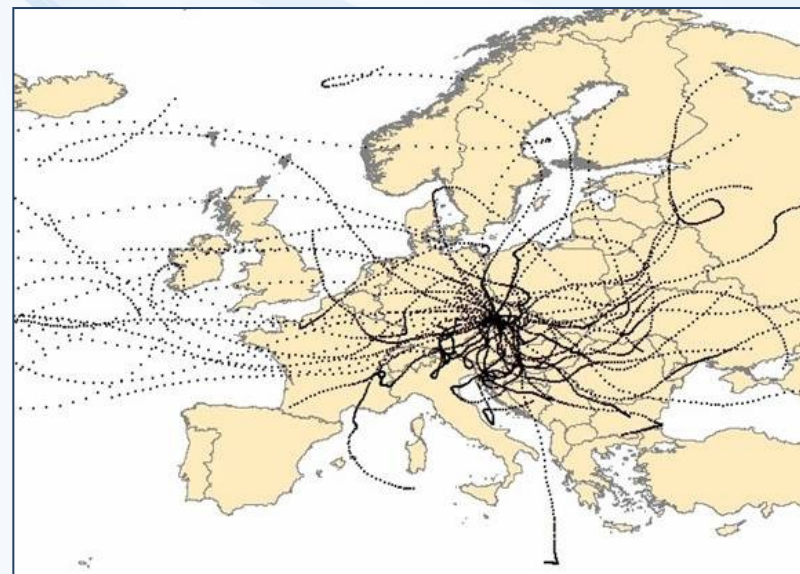
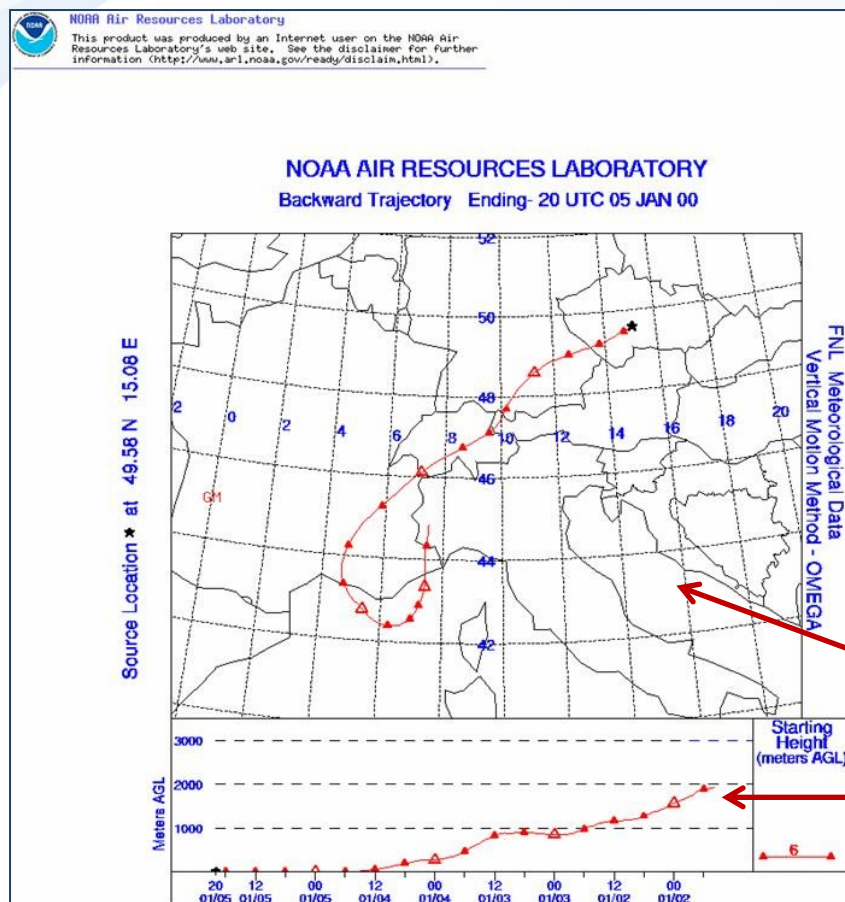
Důležitý výstup: **zeměpisné souřadnice bodů značících začátky dílčích úseků trajektorie**, které udávají polohu vzdušné masy v pravidelných intervalech (zde po 1 hod) .



Výstupy z modelu HYSPLIT

Jednotlivá trajektorie jako obrázkový výstup

Shluk trajektorií zobrazených v GIS



poloha trajektorie

výška trajektorie

5. Receptorové modely



Receptorové modely

$$x_{ij} = \sum_{k=1}^p c_{ik} s_{kj}$$

počet nezávislých zdrojů p

koncentrace látky i v emisích ze zdroje k

koncentrace látky i ve vzorku j odebraném na receptoru

celkové emise ze zdroje k přispívající ke znečištění vzorku j

Podmínky, které model musí splňovat:

- objasňuje pozorované skutečnosti
- látky v predikovaném složení zdroje nesmí mít záporné koncentrace
- suma predikovaných dílčích příspěvků z každého zdroje musí být menší nebo rovna celkové koncentraci polutantů v receptoru

Rozdělení receptorových modelů podle znalostí o zdroji: známé složení emisí ze zdroje, známé tracery (pro daný typ zdroje charakteristické látky) a zcela neznámý zdroj. Liší se vstupními daty a výstupními informacemi.

Typy receptorových modelů - výběr

Vyhodnocení trajektorií
vzduchových mas

Model	Jsou zahrnuté trajektorie?	Je zdroj známý?	Výstup
Residence Time Analysis	Ano	Ne	Možné zdrojové oblasti
Potential Source Contribution Function (PSCF)	Ano	Ne	Možné zdrojové oblasti
Concentration weighted trajectory (CWT)	Ano	Ne	Možné zdrojové oblasti
Residence Time Weighted Concentration (RTWC)	Ano	Ne	Možné zdrojové oblasti
Ground Mean Source Loadings (GMSL)	Ano	Ne	Možné zdrojové oblasti
Cluster Analysis	Ano	Ne	Směry výskytu možných zdrojových oblastí
Quantitative Bias Trajectory Analysis (QBTA)	Ano	Ne	Určení příspěvků ze zdrojů
Backward Lagrangian Particle Dispersion Model (LPDM)	Ano	Ne	Odhad intenzity emisí ze zdrojů, funkce popisující změnu vlivu zdrojů v čase a prostoru
Principal Component Analysis (PCA), Positive Matrix Factorization (PMF)	Ne	Látky charakteristické pro daný typ zdroje – ano Poloha zdroje – ne	Identifikace typů zdrojů
Chemical Mass Balance (CMB)	Ne	Profily složení emisí pro všechny kategorie zdrojů	Kvantitativní popis příspěvků z jednotlivých zdrojů

Statistické metody



Vyhodnocení trajektorií vzduchových mas

Různým metodám je společný princip vyhodnocení v prostoru:

- oblast zájmu je rozdělena na jednotlivé buňky pomocí mřížky, kterou si můžeme představit jako čtverečkovaný papír
- body (jejich poloha je daná zeměpisnými souřadnicemi) značící počátky dílčích úseků všech trajektorií jsou zobrazeny v mřížce
- jsou vyloučeny ty buňky mřížky, které obsahují počet bodů menší než zvolené kritérium (tyto oblasti mají žádný nebo minimální vliv na koncentrace polutantů zjištěné v receptoru, protože tudy ve studovaném období neprošly žádné nebo jen málo vzdušných mas vzorkovaných v receptoru)
- v každé buňce je aplikován zvolený model, výsledné hodnoty jsou použity pro tvorbu map znázorňujících polohu možných zdrojových oblastí

Výstupy receptorových modelů

Receptorové modely využívajících zpětných trajektorií vzdušných mas mohou přispět k:

- určení možných známých i neznámých zdrojových oblastí ovlivňujících koncentrace látek v místě měření kvality ovzduší (určení možných zdrojových oblastí na různé vzdálenosti)
- vyloučení některých oblastí jako zdrojových pro dané místo měření kvality ovzduší
- prvotnímu popisu možných zdrojů, které lze po jejich ověření inventarizovat, stanovit příslušné emisní faktory a takto přispět k definování efektivních opatření na regulaci obsahu znečišťujících látek v ovzduší
- vysvětlení odchylek a hladin koncentrací naměřených na pozadových stanicích (tedy stanicích se zanedbatelným vlivem místních zdrojů) a jejich změn v čase
- popisu změny intenzity a polohy možných zdrojových oblastí v čase
- diskusi dalších otázek souvisejících s osudem POPs a dalších znečišťujících látek v prostředí

Chemical Mass Balance

Model CMB kombinuje znalosti o chemických a fyzikálních vlastnostech plynů a/nebo částic změřených u zdrojů a receptorů za účelem kvantifikace příspěvků jednotlivých zdrojů k receptoru. Je založen na **effective variance least-squares method (EVLS).**

Pro smysluplnou aplikaci CMB je nutné splnění těchto podmínek:

- Složení emisí zdrojů je stálé
- Studované polutanty nejsou reaktivní (nelze je tedy aplikovat např. na sekundární aerosol)
- Do výpočtů jsou zahrnuty všechny zdroje významně přispívající ke znečištění v místě receptoru
- Mezi nejistotami popisu zdrojů není žádný vztah (tj. jsou na sobě nezávislé)
- Počet zdrojů je menší nebo rovný počtu uvažovaných polutantů
- Nejistoty měření jsou náhodné, nekorelované a normálně rozložené

CMB lze stáhnout ze stránek US EPA: http://www.epa.gov/scram001/receptor_cmb.htm

Nepřímé ordinační analýzy

Mezi nejčastější metody nepřímé ordinační analýzy patří v receptorovém modelování PCA (Principal Component Analysis) a PMF (Positive Matrix Factorization).

Obě metody se pokoušejí nalézt skryté veličiny, označované jako hlavní komponenty či faktory, které vysvětlují variabilitu a závislost proměnných. PCA operuje s uzavřeným systémem, ve kterém je veškerá variabilita v hodnotách proměnných vysvětlena proměnnými samotnými. PMF naopak předpokládá, že k dispozici nejsou všechny proměnné, které popisují daný problém a že existuje i variabilita, která není vysvětlena jednotlivými faktory a přísluší reziduální složce (neznámé či chybové).

Interpretace výsledných hlavních komponent /faktorů není vždy jednoduchá, provádí se srovnáním s referenčními faktory (založenými na znalostech o složení emisí ze zdrojů).

PCA lze spočítat např. v programu STATISTICA, PMF lze stáhnout z webu US EPA: <http://www.epa.gov/heasd/products/pmf/pmf.html>



Případová studie: statistické vyhodnocení trajektorií

Cíle případové studie:

- Určení možných zdrojových oblastí POPs pro regionální pozadovou observatoř Košetice
- Zjištění změn v poloze zdrojových oblastí v čase
- Porovnání výsledků dvou přístupů ke statistickému vyhodnocení trajektorií vzdušných mas

Parametr	Zvolená hodnota
Model	HYSPLIT
Receptor	Košetice
Typ trajektorie	3D zpětná
Počáteční výška	500 m AGL
Frekvence výpočtu	8 trajektorií pro každý 24hod vzorek
Délka	96 hod
Doprovodná meteo data	žádná

Pravidelná
mřížka
pokrývá
Evropu (tj.
oblast
zájmu)

Případová studie: aplikace metody PSCF

počet bodů znázorňujících začátky dílčích úseků
vybraných trajektorií (těch, jimž byla přiřazena
koncentrace polutantu změřená v receptoru
vyšší než zvolené kritérium) v dané buňce
mřížky

hodnota PSCF
pro danou buňku

$$PSCF_{ij} = m_{ij} / n_{ij}$$

počet bodů
znázorňujících
začátky dílčích
úseků všech
trajektorií v dané
buňce mřížky

Hodnotu PSCF pro danou buňku lze chápat jako podmíněnou pravděpodobnost toho, že koncentrace látky zjištěné v receptoru, které byly vyšší než zvolené kritérium (např. medián), lze zdůvodnit přechodem vzorkovaných vzdušných mas přes oblast definovanou danou buňkou.

Výsledky jsou kategoriální povahy („ano“ vs. „ne“, tj. oblast reprezentovaná danou buňkou je nebo není možnou zdrojovou oblastí látek zjištěných v receptoru).

Případová studie: aplikace metody GMSL

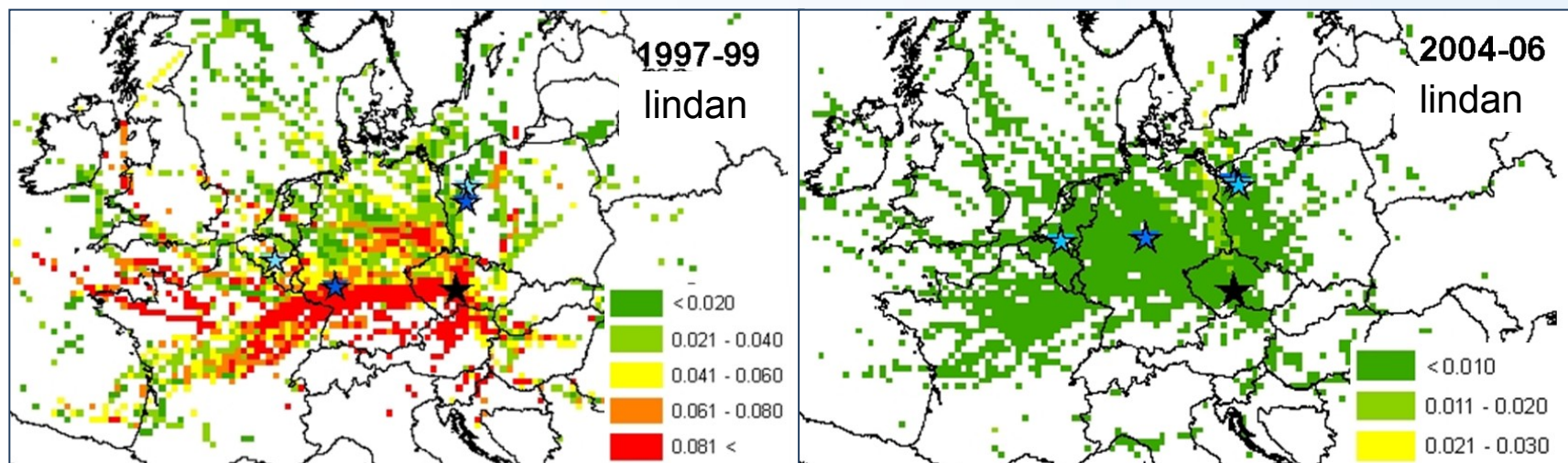
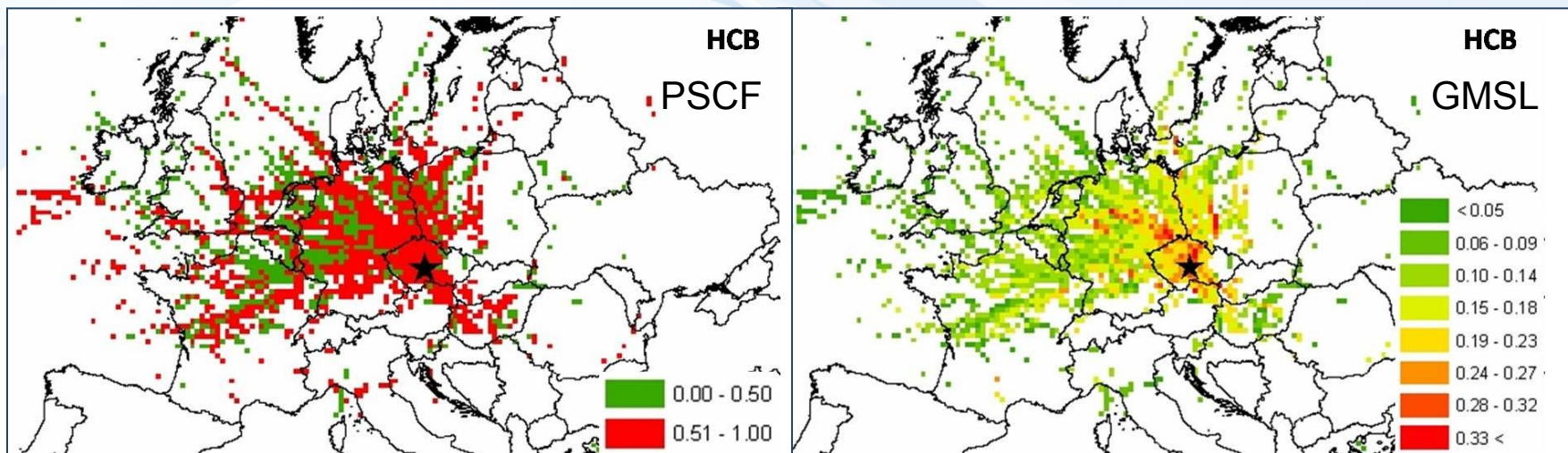
Lineární časové vážení, které koriguje vliv disperze na přesnost polohy trajektorie a vliv depozice na koncentraci polutantů ve vzduchové mase

$$GMSL = \sum_{i=1}^I \sum_{j=0}^J \frac{c_{ij} [1 - (h_{ij}/J)]}{n_g} L_0$$

kde I je celkový počet trajektorií; c_{ij} je atmosférická koncentrace polutantu v receptoru v době počátku trajektorie i , n_g je celkový počet bodů znázorňujících počátky hodinových úseků trajektorií v buňce g ; h_{ij} je počet hodin zpětně v čase od počátku trajektorie po bod úseku j trajektorie i ; J je délka trajektorie v hodinách a L_0 představuje vliv zdrojů na zemském povrchu na složení vzduchové masy (rovno 1 pro body trajektorií spadající do buňky g a rovno 0 pro všechny ostatní body).

Výsledky jsou kontinuální povahy (obdržíme gradient hodnot GMSL, které představují intenzitu vlivu oblasti reprezentované danou buňkou na koncentrace polutantu v receptoru).

Výstupy případové studie



Užitečná studijní literatura

- Beyer A., Mackay D., Matthies M., Wania F., Webster E. (2000). Assessing long-range transport potential of persistent organic pollutants. *Environmental Science and Technology* 34, 699-703.
- Dvorská A., Lammel G., Klánová J., Holoubek I. (2008) Kosetice, Czech Republic – Ten years of air pollution monitoring and four years of evaluating the origin of persistent organic pollutants. *Environmental Pollution* 156, 403-408
- Dvorská A., Lammel G., Holoubek I. (2009) Recent trends of persistent organic pollutants in air in central Europe - Air monitoring in combination with air mass trajectory statistics as a tool to study the effectivity of regional chemical policy. *Atmospheric Environment* 43, 1280-1287
- Jacobson M. (2005) *Fundamentals of atmospheric modeling*. Cambridge University Press, UK
- Seinfeld J.H., Pandis S.N. (2006) *Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change*. Wiley, USA
- Stohl A. (1998) Computation, accuracy, and application of trajectories – a review and bibliography. *Atmospheric Environment* 32, 947-966
- Wania F., Mackay D. (1996) Tracking the distribution of persistent organic pollutants. *Environmental Science and Technology* 30, 390A-396A
- a dále odkazy z uvedené literatury

Webové zdroje obrázků

Seznam webových zdrojů použitých obrázků:

<http://www.malaysia-maps.com/malaysia-states-map.htm>

<http://www.channelnewsasia.com/stories/southeastasia/view/448672/1.html>

www.clkr.com

<http://journals.ametsoc.org/doi/abs/10.1175/2010JAS3310.1>

<http://staff.fcps.net/mbrooks/bio.htm>

<http://www1.nilu.no/projects/globalpcb/>

<http://www.leirecycle.com/services/pcb-waste/transformers/>

<http://www.conceptart.org/forums/showthread.php?t=162651>

<http://boneblogger.com/effects-of-climate-change-on-polar-bears/>

<http://www.telegraph.co.uk/topics/about-us/style-book/1435302/Telegraph-style-book-places-and-peoples.html>

www.clipartheaven.com

<http://articlesofinterest-kelley.blogspot.com/2011/03/nuclear-nightmare-japanese-reactor.html>

<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/nucene/chno.html>

<http://www.hopeforchernobylschild.org/about/about.htm>

<http://www.dailymail.co.uk/news/article-1371793/Japan-nuclear-crisis-Fukushima-plant-entombed-concrete-radiation-leak.html>

<http://vysivka.blog.cz/0906>

<http://www.maths.mq.edu.au/texdev/MathSymp/Finnigan/node2.html>

<http://www.kasravi.com/cmu/tec452/Aerodynamics/WindTunnel.htm>

<http://wikipedia.org>

