Lagrangian Tools for Aerosol Modelling

FLEXPART

Petra Seibert[1,2], Anne Philipp[2]

[1]Institut für Meteorologie, BOKU Wien
[2]Institut f. Meteorologie u. Geophysik, Univ. Wien

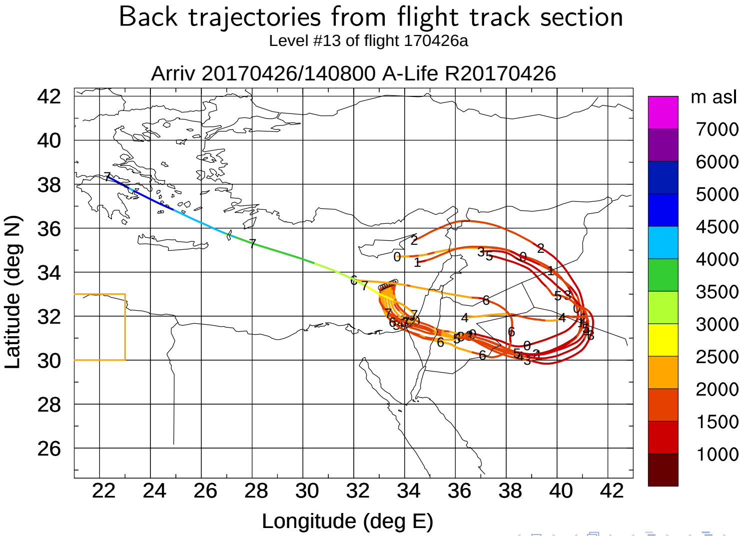
1st Vienna Atmospheric Aerosol Workshop
16 November 2017

Produced with LaTeX-Beamer

FLEXTRA and FLEXPART

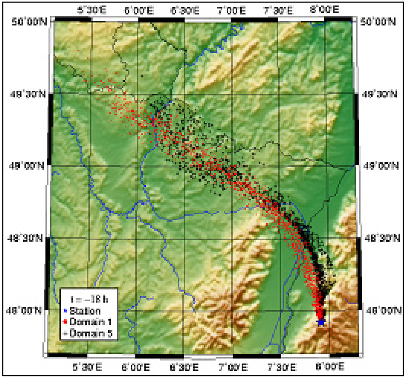
	FLEXTRA	**FLEXPART**
Model type	Trajectory model	Lagrangian particle
Mean-wind transport	yes	yes
Forwad & backward	yes	yes
Turbulent diffusion	no	yes
Typical #trajectories	1 – 1000	10,000 – 10,000,000
Input fields	$(\vec{v}, T)(\varphi, \lambda, \eta, t)$	$+ s_{H2O}, CP, LSP$, sfc fluxes
Concentration output	no	yes
Deposition, settling	no	yes
Data sources	ECMWF, NOAA-GFS	ECMWF, NOAA-GFS, WRF
Availaballity	free (GPL) `https://www.flexpart.eu/`	

Example: FLEXTRA in A-Life

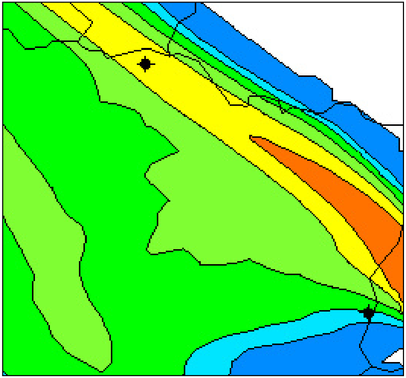


Example: FLEXPART backward simulation Schauinsland

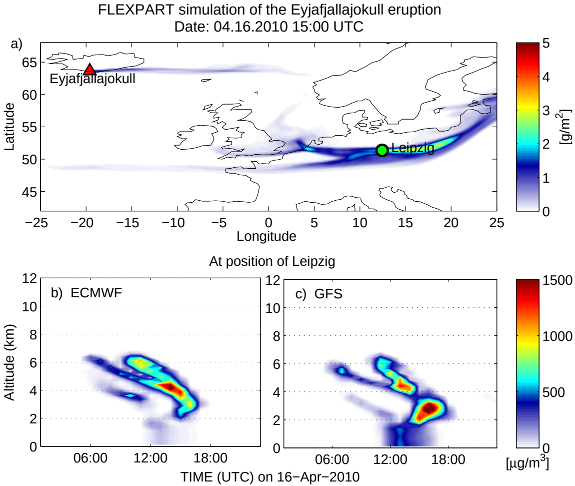
particle positions



gridded concentration



Example: FLEXPART forward simulation Eyjafyalljokull



Simulation by NILU

Stohl et al., 2011, Determination of time- and height-resolved volcanic ash emissions for quantitative ash dispersion modeling: the 2010 Eyjafjallajökull eruption. Atmos. Chem. Phys. 11 (2), 5541?5588.

Inverse modelling

Methodology

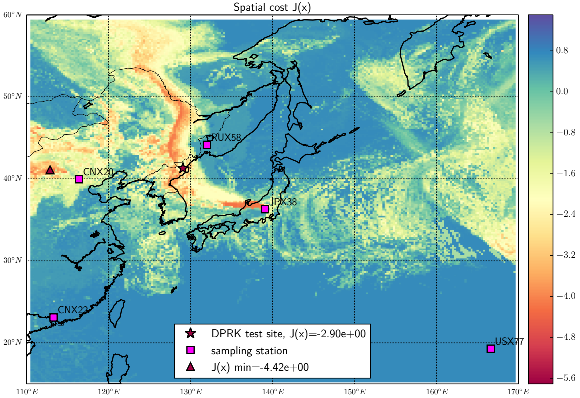
- $\mathbf{y} = \mathbf{M}\mathbf{x}$: concentration $\mathbf{y}$ as product of source-receptor matrix $\mathbf{M}$ and source vector $\mathbf{x}$
- $\mathbf{M}$ is calculated by FLEXPART (fwd or bwd is possible)
- Unknown $\mathbf{x}$ is found by analyically minimising the cost function (requires solution of LSE)

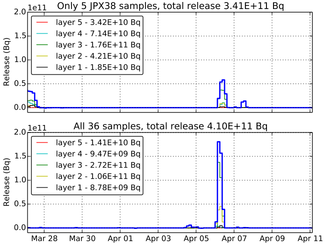
$$J(\mathbf{x}) = \underbrace{(\mathbf{y}-\mathbf{M}\mathbf{x})^T\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}-\mathbf{M}\mathbf{x})}_{\text{model-obs mismatch}} + \underbrace{(\mathbf{x}-\mathbf{x}_a)^T\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_a) + \epsilon(\mathbf{D}\mathbf{x})^T(\mathbf{D}\mathbf{x})}_{\text{regularisation}}$$

- Model error (co-)variance $\mathbf{R}$ estimated using "pseudo-ensemble" of model runs and added to measurement error
- First-guess solution $\mathbf{x}_a$
- Negative parts of solution suppressed via iterative process

North Korea nuclear test 2013

- 3 non-zero observations at Takasaki, Japan of Xe-133
- Below-MDC-observations for other days and stations
- We assume single grid cell releases
- Try out each grid cell, plot colour-coded cost function values J





Aerosol-related applications at BOKU-Met

- NPP accident consequence studies (1997-ongoing)
- Comprehensive Nuclear Test Ban Treaty Monitoring (2000-ongoing)
- Sources of Air Pollution Relevant for the Austrian Biosphere Reserve Wienerwald (2005-2009)
- Volcanic Ash Dispersion and Inverse Modelling (ca. 2008-2011)
- Anne Philipp's PhD project, includes improvement of the deposition parameterisation in FLEXPART and model validation / software QA.
- A-Life Support (2017)

See `https://meteo.boku.ac.at/envmet/#projects` and `http://homepage.univie.ac.at/petra.seibert/`

Future Work

1. Continue support for A-Life (and other projects?)
2. Ongoing improvements of FLEXPART, finish PhD Anne Philipp
3. Nuclear applications
   - inverse modelling of Chernobyl and Fukushima with new measurement data, new meteorological input data (ERA5), and improved methodologies
   - flexRISK update?
   - continue CTBT verification support
4. Inverse modelling / FLEXPART-based source contribution assessment for aerosol in Eastern Austria ???
5. Long-term future of FLEXPARTin Vienna?

RESERVE SLIDES

Was kann FLEXPART? /1

- Prozesse
  - Transport mit mittlerem Wind
  - Diffusion durch Turbulenz und mesoskalige Fluktuation
  - Vermischung durch konvektive Wolken
  - Trockene Deposition von Partikeln und Aerosolen
  - Gravitationsbedingtes Ausfallen von Partikeln
  - Nasse Deposition
  - Radioaktiver Zerfall und chemischer Abbau mit gegebener Rate
  - Vorwärts- und Rückwärtsrechnung
- Quellen
  - Punkt-, Linien-, Flächen- und Volumsquellen in beliebiger Konfiguration
  - automatische Tages- und Wochengänge
  - beliebig viele Spezies auf einem Rechenpartikel (Ausnahme settling)

Was kann FLEXPART? /2

- Output
  - Konzentration und Mischungsverhältnis auf Lat-Lon-Höhe Gitter
  - Konzentration und Mischungsverhältnis an einem Punkt (Kernel)
  - Trockene und nasse Deposition auf Gitter und an Punkt
  - Horizontale und vertikale Flüsse
  - Rückwartmodus: Quell-Rezeptor-Sensitivität der Flächen- und Volumsquellen, Deposition, Anfangswerte, Flüsse am Rand
  - Beliebige Zeitauflösung
  - Altersverteilung in Klassen
  - Partikeldump, Warm start
- Sonstiges
  - Clustern von Partikeltrajektorien zu Fahnen
  - Domainfüllende Simulationen (Lagrangesche Beschreibung der Bewegungen in der Atmosphäre)
  - dasselbe mit einem Stratosphärentracer

Wie arbeitet FLEXPART?

1. `grib_api` installieren, Fortran-Programm übersetzen
2. Meteorologische Felder (ECMWF oder GFS) in GRIB format bereitstellen
   - 3D: $u, v, \dot{\eta}, T, q$, 2D: diverse Flüsse am Boden, CP, LSP, p_0, h
3. Statische Daten (Landoberflächeninformation) sind inkludiert
4. Definition von Run-Parametern, Ausgabegittern/-punkten, Quellen
5. Programmstart $\rightarrow$ Rechenpartikel
   - Freisetzung und Anfangsmasse
   - Transport
   - Prozesse, die auf Masse jeder Spezies auf einem Partikel einwirken
   - Beiträge zu Konzentration und Deposition aufaddieren
   - Output in gepacktem Format ausschreiben
6. Graphisches Quicklook-Tool anwenden oder
   Output mit eigenem Programm weiter verarbeiten