



**БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
НАЦИОНАЛЕН ИНСТИТУТ ПО ГЕОФИЗИКА, ГЕОДЕЗИЯ И
ГЕОГРАФИЯ**

Ивелина Христова Георгиева

**Локални процеси на пренос и химични трансформации в
атмосферата**

АВТОРЕФЕРАТ

на

дисертация за придобиване на образователна и научна степен “Доктор” по
специалност 01.04.08 "Физика на океана, атмосферата и околоземното
пространство"

Научен ръководител: Член Кор. Проф. дфн Костадин Ганчев Ганев

София, 2017

Данни за дисертационния труд:

Брой страници	240
Брой фигури	205
Брой таблици	11
Брой цитирани заглавия	95

Дисертацията е обсъдена и допусната до защита на разширено заседание на департамент „Геофизика“ на НИГГГ-БАН, състояло се на 22 февруари 2017 г.

Заштитата на дисертацията ще се състои на2017 г. от часа в зала 101 на НИГГГ-БАН на открито заседание на научно жури в състав:

1. Член Кор. Проф.дфн Костадин Ганев
2. Доц. д-р Ренета Димитрова
3. Проф. д-р Димитър Атанасов
4. Доц. д-р Емилия Георгиева
5. Проф. дфн. Екатерина Бъчварова

Автор: Ивелина Христова Георгиева

Заглавие: Локални процеси на пренос и химични трансформации в атмосферата

Материалите за защитата са на разположение на интересуващите се в стая 105 на НИГГГ-БАН, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 3.

СЪДЪРЖАНИЕ

Увод	<u>2</u>
Актуалност на проблема	<u>2</u>
Цели и задачи на изследването	<u>2</u>
Структура на дисертационния труд	<u>3</u>
Благодарности	<u>3</u>
Глава I: Методика на изследването	<u>4</u>
I.1. Въведение	<u>4</u>
I.2. Обзор на числените модели използвани при изследването	<u>4</u>
I.3. Методика - модели, входни данни, параметризационни схеми, области и телескопизация на избраните области, емисионно моделиране, инвентаризация на емисии в страната	<u>5</u>
I.4. Грид моделиране	<u>9</u>
I.5. Достоверност на резултатите от компютърните симулации	<u>10</u>
Глава II: Климат на атмосферно замърсяване за избрана градска среда - гр. София	<u>11</u>
II.1. Въведение	<u>11</u>
II.2. Осреднени полета на приземни концентрации на различни замърсители	<u>12</u>
II.3. Статистически характеристики на приземните концентрации на различните замърсители на територията на град София и за отделни точки.	<u>15</u>
II.4. Изводи	<u>17</u>
Глава III: Индекс за качеството на атмосферния въздух за град София.	<u>18</u>
III.1. Въведение	<u>18</u>
III.2. Индекс за качеството на атмосферния въздух	<u>18</u>
III.3. Анализ на пространствено - времевото поведение на индекса за качество на атмосферния въздух за град София	<u>19</u>
III.4. Изводи	<u>22</u>
Глава IV: Оценка приноса на различните видове замърсители и различните категории източници (SNAP категории) към замърсяването на град София и за отделни точки.	<u>23</u>
IV.1. Въведение	<u>23</u>
IV.2. Емисионни сценарии и някои полета на ансамбълово осреднените приноси на отделните категории източници към приземните концентрации.	<u>23</u>
IV.3. Годишно и сезонно осреднени приземни приноси на отделните източници за отделни точки от град София.	<u>27</u>
IV.4. Изводи	<u>29</u>
Глава V: Оценка приноса на различните процеси към формиране на замърсяването за град София.	<u>31</u>
V.1. Въведение	<u>31</u>
V.2. Функцията на модела CMAQ - "Integrated Proces Rate Analisys"	<u>31</u>
V.3. Осреднените приземни приноси на отделните процеси	<u>31</u>
V.4. Годишно и сезонни осреднени приземни приноси на отделните процеси водещи до образуването на различни замърсители за територията на град София и за различни точки от град София.	<u>37</u>
V.5. Изводи	<u>39</u>
Заключение	<u>41</u>
Литература	<u>43</u>
Списък на съкращенията	<u>47</u>
Приноси	<u>50</u>

Увод

Въздухът е жизнената среда на човека и редица атмосферни, социални и демографски, параметри имат голямо значение за качеството на живот и здравето на хората. Все повече в практиката навлиза терминът "качество на живот". Подобряването на състоянието на компонентите на околната среда в населените места е задължително за постигане на по-високо качество на живот. Качеството на живот в градовете е пряко зависимо от баланса между социално равенство, приходи, жилища, благоустройствство, чиста околнна среда, социални отношения, здравеопазване и образование.

Градската околната среда, осигуряваща по-добро качество на живот, трябва да отговаря на следните условия: добро качество на атмосферния въздух, ниско ниво на шумово замърсяване, чиста и достъпна вода, градски дизайн, осигуряващ достъпни и поддържани публични и зелени площи, благоприятен локален климат.

Населението на света се концентрира предимно в градовете. Очаква се 80 % от живеещите по света девет милиарда души през 2050 г. да обитават градските зони. Много от градовете трудно се справят със социални и екологични проблеми, които са в резултат на пренаселване, бедност, замърсяване и автомобилен трафик. По света градовете заемат едва 2 % от земната повърхност, а в тях живеят половината от населението на планетата. Европа е един от най-урбанизиранныте континенти като 75 % от хората живеят в градове. Има вероятност тези показатели да нараснат до 80 % до 2020 г. (<http://www.eea.europa.eu/bg/articles/ot-gradski-prostranstva-do-gradski-ekosistemi>)

Развитието на градовете има широко европейско измерение. Големите градове взаимодействват и влияят на околната територия, като така оказва въздействие върху екологията на много по-широва зона.

Човешката дейност в градовете води до интензивна промяна на постилащата повърхност (Changnon 1992), например използването на материали с висок топлинен капацитет при изграждането на сгради и пътища, което влияе върху локалния микроклимат. Разликата в енергийния баланс, температурата, влажността, оттичането след валеж, е съществена между градски район и заобикалящата го среда. „Градския остров на топлина“ (ГОТ) е свързан със задържането на топлина в бетона и другите строителни материали за по-дълго време през нощта, в сравнение с извън градската постилаща повърхност (Bornstein 1987; Oke 1988; Emmanuel and Fernando 2007, Fernando 2010; Fernando et al. 2010). Създаденият градски микроклимат е уникален за всеки район, поради специфичните орография и характеристики на постилащата повърхност (топлопроводимост, отражателна способност, влажност, грязавост и т.н.). Многото нерешени въпроси продължават да бъдат предизвикателство пред световната научна общност, а в България, най-голямо препятствие е липсата на достатъчно експериментални данни събрани за нашата страна.

Замърсяването на въздуха в Европа в периода 1990–2004 г. показва, че въпреки намаленията на емисии, високите концентрации на фини прахови частици и озонът при земното равнище продължават да причиняват проблеми в много големи градове и околните области. Фините прахови частици в момента са общопризнати като заплаха за човешкото здраве вследствие на замърсяването на въздуха. Според Световната здравна организация (СЗО) смъртта на около 100 000 души на година може да е свързана със замърсяването на атмосферния въздух в големите градове на Европа, като така скъсява продължителността на живота средно с една година.

Основна причина за замърсяването на въздуха е увеличаването на моторизираният трафик, който също води до намаляване на наличните зелени и тихи пространства в центровете на големите градове. Това кара хората да се местят в покрайнините извън града и във вътрешността на страните. Новите градски зони с ниска гъстота водят до по-голямо използване на индивидуалния транспорт, което изостря съществуващите проблеми (<http://www.eea.europa.eu/bg/themes/urban/about-the-urban-environment>) (<http://www.eea.europa.eu/bg/signali-2016-g/statii/transport-i-obshtestveno-zdrave>)

1. Цели и задачи на изследването

Обширни проучвания и симулации за климата и състава на атмосферата в България бяха извършени с помощта на актуални инструменти за моделиране и подробни надеждни входни данни. Тези компютърни симулации са за достатъчно дълъг период от време и с добра резолюция (Gadzhev et. all. 2011 a,b, 2012 , 2013 a,b,c, 2014 a,b,c, 2015 a,b,c).

Следващата стъпка в изучаване на климата на състава на атмосферата е извършването на симулации в градски мащаб.

Градския климат на замърсяване в България не е системно проучен все още, макар че е било извършвано моделиране на замърсяването на въздуха за град София (Ganev, 1981, Ganev and Yordanov, 1981, 1983, 1985, Ganev et. all., 2004) и също така от няколко години се прави прогноза на замърсяването на въздуха за града (Syrakov et. all . 2013, 2014, Етрополски Е., 2015).

Основана цел: на настоящото изследване е изучаването на закономерностите на атмосферното замърсяване в локални мащаби и градска среда, по-специално на град София, а именно:

- ✓ Получаване на достатъчно надежден ансамбъл, осигуряващ статистическа значима оценка за климата на атмосферно замърсяване в локални мащаби (включително и в градска среда)
- ✓ Изчерпателна оценка и анализ на полетата на замърсяване на отделните химически видове замърсители.
- ✓ Пресмятане на индекс на замърсяване за гр. София. Анализ на неговото пространствено - времево поведение.
- ✓ Изучаване на локалните процеси на пренос и химични трансформации в атмосферата за градски райони - град София.
- ✓ Определяне приноса на различните видове замърсители и източници към замърсяването на избраната градска среда – гр. София.
- ✓ Определяне приноса на различните процеси към формиране замърсяването в град София.

2. Структура на дисертационния труд

Дисертационният труд се състои от Увод, Пет глави, Заключение, Приноси и Литература. Към всяка от петте глави са приложени "Приложения" в електронен формат.

В Глава I е направен кратък преглед на използваните модели при моделиране състава на атмосферата, входни данни, параметризационни схеми, области, емисионно моделиране и инвентаризация на емисии в страната. В Глава II са разгледани и коментирани някои осреднени полета на приземни концентрации и статистически им характеристики на различните замърсители в София. В Глава III са представени някои резултати от компютърни симулации, показващи индекса за качеството на атмосферния въздух за град София. Глава IV е посветена на изследване приноса на различни категории източници към общата картина на замърсяването в град София. Глава V е посветена на изследване на различните процеси на пренос и трансформация и оценка на техния принос към формиране замърсяването в за град София.

3. Благодарности

Настоящата работа е извършена с подкрепата на:

- Българския Национален Фонд "Научни Изследвания" (договор ДЦВП-02/1/29.12.2009).
- Министерство на образованието и науката на България (грант Д01-206/21.07.2014)
- Европейски социален фонд 2007–2013 Оперативна програма „развитие човешките ресурси проект BG051PO001-3.3.06-0063 „Програма за мултидисциплинарно обучение на докторанти и млади учени насочена към подобряване на дейностите в България по изграждане на интегрирана система за наблюдение и информационно обслужване в метеорологията, хидрологията и геофизиката с цел намаляване на риска от бедствия, рационално използване и опазване на природните ресурси и изследване на климатичните промени”.
- Проекта от ЕС -H2020 project 675121(project VI-SEEM)
- Проекта от ЕС-7РП grant PIRSES-GA-2013-612671 (project REQUA).
- Проекта от ЕС-7РП grant 261 323 (проект EGI-INSPIRE).
- Специални благодарности на на US EPA, US NCEP, EMEP и TNO за предоставянето на безплатна база данни и софтуер и Европейската инвентаризация на антропогенни емисии с висока резолюция.
- По време на работата по дисертацията авторът е бил стипендант на Световната Федерация на Учените (World Federation of Scientists).

Дължа благодарност и на редица колеги, които по един или друг начин ми помагаха при работата върху дисертационния труд:

Член. Кор. Костадин Ганев
гл.ас. д-р Георги Гаджев
Мария Проданова
проф. Димитър Сираков
доц. д-р Ренета Димитрова
доц. д-р Емилия Черкезова
гл.ас. Мария Дурчова
доц. д-р. София Ивановска
доц. д-р. Емануил Атанасов

Глава I: Методика на изследването

I.1. Въведение

При моделирането на замърсяването на въздуха от особено значение е да се направи адекватен избор, верификацията и валидацията на различните модели, разглеждане на техните симулационни възможности и ограничения, както и чувствителността и реакциите при варирането на различните параметри. Такъв вид изследване налага и изиска използването на големи компютърни ресурси и може да се осъществи чрез използването на компютърни кълстери и грид като изчислителна платформа.

В глава I.2. ще бъдат разгледани и обяснени методите използвани в настоящия дисертационен труда, самите модели и техния начин на работа.

В I.3. е обърнато внимание на входните данни необходими за моделите, избраните параметризационни схеми, области и емисионното моделиране и инвентаризацията на емисиите.

В глава I.4 са показани необходимите компютърни ресурси при провеждане на такива изследвания.

I.2. Обзор на числените модели използвани при изследването

Качеството на моделите и на входните данни са от огромно значение за успешните компютърни симулации. Особено важно е да се постигне органично съответствие между използвани модели и входни данни – използването на много усъвършенствани модели при наличието на недостатъчно детайлни или некачествени входни данни може да доведе дори до по-лоши резултати като генериране на грешки и нарастващи при числените симулации. От особена важност е качеството на емисионните данни. Целия процес на компютърно симулиране е обработка на емисионните данни, което налага в този раздел, наред с моделите, да бъде направен и кратък обзор на създаването на инвентаризация на емисиите.

Европейската и Национална нормативна база няма стриктни и определени изисквания и дефинции за моделите, с които да се правят симулации за състава на атмосферата, това е и причината да има и да се използват изключително голям набор от такива модели. Тези модели са различни по сложност и разполагат с различна физическа основа, и са приспособени към многообразието на мащабите на пренос – от глобален до локален мащаб (Гаджев Г., 2013).

За целите на настоящата работа е използвана система от модели US EPA Models-3 System, която съчетава в себе си един метеорологичен модел, химически транспортен модел за пренос на данни и един емисионен модел. Тази система от 3 модела има висока оценка на симулационни възможности и е призната от световната научна общност.

В настоящата част от главата ще бъдат разгледани трите компонента от US EPA Models-3 System.

WRF - е съкращение от Weather Research and Forecasting (WRF), (Dudhia, 1993, Grelletal., 1994), (Shamarocketal., 2007) <http://www.wrf-model.org/> е свободен за достъп модел, който е предназначен за научни изследвания и приложения, за числена прогноза на времето (NWP) и за атмосферни симулации. Развитието на WRF е с цел изграждане на следващо поколение модел за прогноза и система за асимилация на данните, за напредък в прогнозирането и ускоряване на трансфера на научните изследвания. WRF е съвместна разработка между Националния център за атмосферни изследвания (NCAR), Мезо и микро мащабната метеорологична организация (MMM), Национална океанска и атмосферна администрация (NOAA), Национален център за прогноза на околната среда (NCEP) и Лаборатория за изследване на земята (ESRL), Агенция на военновъздушните сили и времето (AFWA), Център за анализ и изследване на бурите (CAPS) и Федералната авиационна администрация (FAA).

В последните години WRF е все по-често използван в целия свят, като изходната информация от него захранва различни дисперсионни модели, включително и CMAQ. Освен това той непрекъснато се развива и подобрява, като достъпът до него е много лесен чрез Internet страницата на модела. WRF се поддържа като модел за обществеността, за да се улесни широка употреба в международен план, за научни изследвания, оперативна работа, и преподаване. Той е подходящ за широк диапазон на приложения за всички вариращи от големи вихри до глобални симулации. Тези приложения включват прогноза в реално време NWP, асимилация на данни и проучвания за развитие, параметризация на физика, научни изследвания, регионален климат, симулации, моделиране на качеството на въздуха, връзката атмосфера-okean, и идеализирани симулации.

Броят на регистрираните потребители на WRF надвишава 6000, а WRF е в системи за изследвания по целия свят.

CMAQ - е съкращение от Community Multiscale Air Quality (CMAQ) (<http://www.cmaq-model.org/>) (Byun etal., 1998, Byun and Ching, 1999) е модел за пренос и химични трансформации в атмосферата и е част от системата US EPA Models-3 System на Американската агенция по околнна среда.

Адвективно-дифузионните процеси в атмосферата се разпростират в широки диапазони от мащаби и в сложна турбулентна среда и за да се обхванат всички процеси трябва да се направи 3D числено моделиране, като най-ефикасния начин за такова е използването на точно тази система Models-3 System. CMAQ като част от системата се обезпечава от една страна от метеорологичен модел (WRF) и от друга страна емисионно от модела SMOKE, който подготвя емисионните данни за дадената област.

CMAQ е Ойлеров модел, “one atmosphere” - отчитащ взаимодействието между множество замърсители (около 100 вида) в различни динамични мащаби. CMAQ симулира: озон, прахови частици (PM), видимост, киселинни отлагания, транспорт на трасери, токсични замърсители, видимост. Модела обработва сложни композиции от замърсителите и сложна конфигурация на източниците, моделира транспорта и дифузията в динамична среда в широки времеви мащаби - от минути до дни и седмици и в съответстващите пространствени мащаби - от локални до глобални. CMAQ работи с уравнения, записани в обобщени координати и може да използва различни картографски проекции. Този подход осигурява съвместимост между CMAQ и използвания метеорологичен модел, който за целите на настоящия дисертационен труд е WRF модела.

SMOKE - е съкращение от The Sparse Matrix Operator Kernel Emissions (SMOKE) (<http://www.smoke-model.org/>) (СЕР, 2003) и е разработен за интегриране на емисионни данни чрез алгоритми за разредени матрици. SMOKE е създаден от Центъра за моделиране на околната среда (EMC), който позволява обработката на емисионни данни за целите на моделите за транспорт на замърсители. Този модел осигурява механизъм за подготвяне на специализирани входни данни и прави възможно прогнозирането състоянието на въздуха. SMOKE може да обработва газови замърсители като CO, NOx, VOC, SOx, PM, като практически няма ограничения в броя и вида на замърсителите, които могат да бъдат използвани от модела.

Основната цел на модела е да трансформира емисионните данни във форматирани входни данни, изисквани от моделите за качество на въздуха.

Обикновени емисионните входни данни са с годишни стойности за всеки емисионен източник. Транспортните химични модели обаче, изискват емисионните данни да са на часовска база за всяка клетка от мрежата и именно SMOKE преработва тези данни, за нуждите на моделите за качество на въздуха.

SMOKE поддържа различни източници на замърсяване - Площни (Area Sources), Мобилни (Mobile Sources) и Точкови (Point Sources), като също са включени и Биогенните (Biogenic). За всеки от отделните видове източници има определени включени модели, които ги изчисляват в системата SMOKE.

Всички модели от системата US EPA Models-3 System са подробно описани и е разгледан техния принцип на работа в **Приложение I.2.**

I.3. Методика - модели, входни данни, параметризационни схеми, области и телескопизация на избраните области, емисионно моделиране, инвентаризация на емисии в страната.

Използваната система от модели е US EPA Models-3 System. Периодът на симулации е 7 годишен, като покрива времето от началото на 2008 година до края на 2014 година.

I.3.1.Метеорологични входни данни:

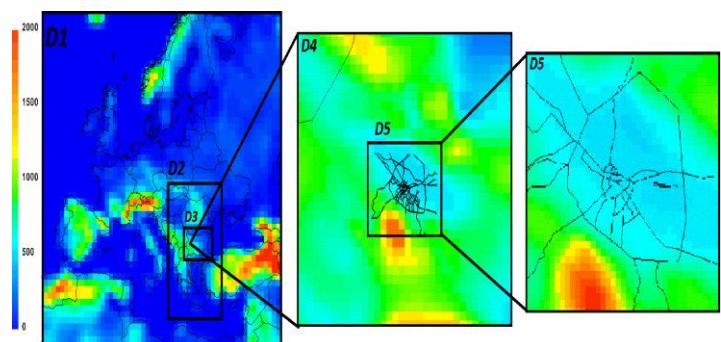
За начало ще бъдат разгледани метеорологичните данни и областите на интегриране.

WRF - Weather Research and Forecasting е мезо - метеорологичен модел използван като метеорологичен пре-процесор в системата Models 3.

В настоящото изследване метеорологичните данни са взети от Американския Национален Център за изследване на атмосферата (NCEP Global Analysis Data) и са със хоризонтална разделителна способност - $1^\circ \times 1^\circ$.

Използваните данни са Re - Analyze, със стъпка на всеки 6 часа, а форматът, в който са данните е GRIB2 формат.

Моделите имат опции за така наречената телескопизация или нестинг, която позволява да се разгледат няколко области вместени една в друга, като разделителна способност постепенно намалява с



Фигура I.3.1.: Нестинг (Телескопизация) на 5-те вместени една в друга области за модела WRF: D1 (Европа) - 81x81 км, D2 (Балкански п-ов) - 27x27 км, D3 (България) - 9x9 км, D4 (София област) - 3x3 км и D5 (София град) - 1x1 км.

дадена стъпка докато се достигне до такава разделителна способност нужна за даденото изследване. В настоящото изследване за метеорологичния модел WRF са подбрани общо 5 области вместени една в друга с намаляваща хоризонтална резолюция. (**Фигура I.3.1.**).

Най - голямата област е D1, която покрива цяла Европа и е със хоризонтална разделителна способност 81x81 км, следващата по малка област вместена в D1 (Европа) е D2 (Балкански полуостров) – 27x27 км, следва D3 (България) покриваща цялата територия на страната с 9x9 км разделителна способност, вместена в D3 е D4 (София област) – 3x3 км и последната и най - фина мрежа е избрана за областта D5 (София град) със разделителна способност 1 x 1 км.

Началните и гранични условия на най-голямата област D1 се подготвят от определен пре-процесор в системата на метеорологичния модел, като се използват метеорологичните полета от Американския Национален Център за Изследване на Атмосферата (NCEP). За всяка следваща вместена област началните и гранични условия се предават от предходната област. Трябва също да се отбележи и използваната възможност за двупосочното взаимодействие между областите или така нареченото "Two - Way Nesting", което позволява симулациите да се извършват едновременно за всяка област, като по-малката вместена област подава информация (обратна връзка) към предходната по-голяма (по-груба) област. При интерполяцията за всяка стъпка по времето на по-грубата мрежа се използват началните и гранични условия за по-фината вместена област, която от своя страна при следваща интерполяция подава данни към предходната по-груба мрежа и по този начин оказва влияние върху нея.

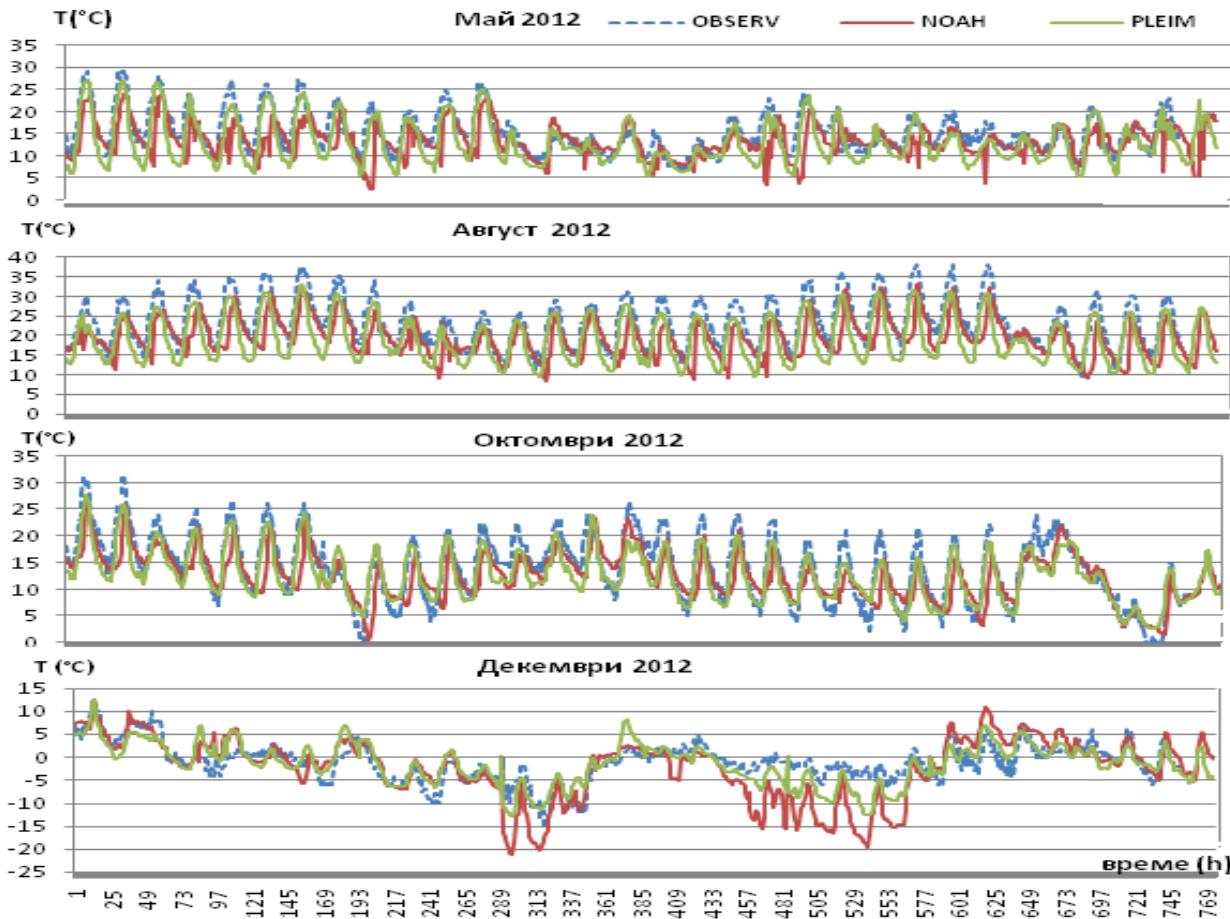
Данни за подложната повърхност и релефа се генерираят от специална програма на модела WRF - GEOGRID, която интерполира статичните географски данни към мрежата в избраната област на интегриране. Глобалната база данни за релефа и подложната повърхност е от USGS (United States Geological Survey) базата данни с разделителна способност 30"x30" и 24 категоризации на подложната повърхност. Освен класификацията на USGS, може също така да се избере и алтернативна класификация на подложната повърхност MODIS, която съдържа 20 категории (21 при включени езера) на подложната повърхност и се прилага при използване на модел за подложната повърхност Noah. При избор на подходяща схема за параметризация на физиката в модела WRF бяха разгледани две различни параметризационни схеми Pleim-Xiu и Noah с двете възможни класификации USGS и MODIS, както и съответните модели за подложна повърхност.

I.3.2. Избор на параметризационни схеми за описание на земната повърхност: Noah/Pleim-Xiu

Моделирането на процесите на земната повърхност е важно за мезо - мащабните метеорологични модели, затова е важна и отговорна задача избора на подходящ модел за земната повърхност (LSMs). Целта на LSMs е по-добро и пълно представяне на повърхностната енергия и влага, както и тяхната способност да представят и реагират на променящите се климатични условия и промените настъпващи в екосистемите. За мезо-мащабно моделиране на метеорологията в дългосрочен план тези промени не са толкова важни, но сезонните промени на растителност и синоптичните промени в повърхностните условия на влага имат значими ефекти върху метеорологичните симулации. Повърхностните процеси, като влажността на почвата и проводимостта на растителността, контролират разпределението на радиационната енергия, на латентна енергия и на топлинните потоци на земната повърхност, които от своя страна оказват силно влияние върху температурата и влажността на въздуха на това равнище, както и върху параметризацията на планетарния граничен слой (PBL). В настоящата глава са разгледани два от най-често използваните модели за земната повърхност Noah и Pleim-Xiu LSM включени във физичните опции на метеорологичния модел WRF. Симулации са направени както при стартиране на модела с Noah LSM и параметризационна схема за микро - физика Noah MP, така и с Pleim-Xiu LSM и Pleim-Xiu схема за параметризация на микро - физика. Резултатите от симулациите са сравнение една с друга, и паралелно с това с данни от измервания, с цел да се определи кой модел и коя схема по - добре описват променящата се климатична среда. Стартирани симулации с WRF модела заедно с двете PBL схеми са за период от 2011 до 2012 година, като резултатите са за тренда на температурата на 2м. и посока и скорост на вятъра. Направени са сравнения между двете схеми и паралелно с реални данни от измервания **Фигура I.3.2.1.**

Направени са сравнения на данните получени от модела с двета типа параметризационни схеми и са сравнени с данните от измервания. На **Фигура I.3.2.1** са показани само по един типичен месец от всеки сезон за 2012 година. Със син цвят е представена графиката на данни от наблюденията, с червен - данните при симулациите на WRF със схема Noah, и със зелен са моделните резултати със схема Pleim. И за 4-те месеца се вижда, че Pleim схемата следва тренда на наблюденията по-добре спрямо Noah. И двета модела не са съвсем точни спрямо данните от наблюденията и двета модела в по-голямата си част показват по-занизени стойности на температурата от реалните измерени.

През по студените, зимни месеци симулациите стартирани със схема Noah дават доста голямо подценяване за стойностите на температурата, спрямо тези на схема Pleim, особено за стойности под 0°C. През топлите месеци, схема Pleim дава по добро приближение за температурата както за максималните, така и за минималните измерени стойности от схемата Noah. Направената проверка и съответните получените резултати водят до извода, че е по-подходящо е да се използва параметризирана схема и модел Pleim-Xiu LSM.



Фигура I.3.2.1 Сравнение на данни от измервания с данни от модела WRF с двете параметризиранни схеми Noah /Pleim за Май, Август, Октомври и Декември 2012 година.

I.3.3. Емисионни входни данни

При моделиране състоянието на атмосферата освен метеорологични данни са необходими и емисионни данни, които служат като вход за химичните транспортни модели (например CMAQ). За целите на настоящото изследване в системата Models 3 емисионният модел, който подготвя данните в определен формат, модел и отразяващ еволюцията във времето на всички замърсители (включени за определения хим. механизъм) е SMOKE – the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System. Този модел е използван именно с цел обработка на емисионните данни за целите на модела за транспорт на замърсители CMAQ. Като входни емисионни данни за територията на България е използвана Националната емисионна база данни, докато извън страната данните са от Нидерландска организация за приложни научни изследвания (TNO) (Vestreng, 2001, Vestrengetal., 2005) със резолюция 0.25° x 0.125° за 10 SNAP категории. Вход за транспортните химични модели, като в настоящата теза се използва CMAQ модела, са метеорологичните изходни данни от WRF модела и емисиите предварително подгответи от SMOKE модела. Стартирани симулациите със CMAQ са проведени не за всички избрани 5 области от **Фигура I.3.1**, а само за 4 от тях - D2 (Балкански п-ов) - 27x27 km, D3 (България) - 9x9 km, D4 (София област) - 3x3 km и D5 (София град) - 1x1 km. Като начални условия за симулациите се използват стандартните за CMAQ профили на концентрациите, получени от глобалните модели, а за начални и гранични условия за всяка следваща вместена област се получават от предходната външна (както при метеорологичния модел).

I.3.4. Инвентаризация на емисии в страната

Икономиката на съвременното общество зависи както от достъпа до наличните енергийни ресурси, така и от начина на получаване на енергия от тях, която се използва навсякъде: за транспорт, отопление, осветление, в промишлеността и селското стопанство. В момента по-голяма част от енергията се произвежда чрез горене на т.н. изкопаеми (фосилни) горива. Емисиите от всички тях са вредни и опасни за човешкото здраве и околната среда. Замърсителите от тези източници са опасни не само в непосредствена близост, но също и на по-големи разстояния. Голяма част от тях търпят химически трансформации при определени атмосферни условия и като резултат се наблюдават вторични неблагоприятни за околната среда ефекти. Замърсителите се класифицират като първични – изпускані в атмосферата директно от различни източници и вторични, които се формират когато първичните замърсители влизат в химични реакции помежду си или с други компоненти, присъстващи във въздуха. Съвременният голям проблем на чистотата на атмосферния въздух както пред развитите, така и пред развиващите се страни са емисиите на първичните замърсители. При определени метеорологични условия, някои от първичните замърсители влизат във фотохимични реакции, които довеждат до образуването на вторични замърсители. Първичните и вторичните замърсители могат да се пренесат далеч от района, в който са образувани и са причина както за замърсяване в селскостопанските райони, така и за трансграничното замърсяване.

Инвентаризацията на емисиите е абсолютно необходима както за моделна оценка нивата на замърсяване, във връзка с оценката на качествата на околнния въздух, така и за идентификация източниците на замърсяване. Инвентаризацията оценява количеството замърсители, изпускані от отделния източник, а така също и комбинираните емисии от много източници.

За стандартизиране на изчислителния процес при оценката на емисиите в международен план най-често се използват методиките IPCC-Методиката е стандарт за докладване на емисиите от парникови газове съгласно Конвенцията на ООН за промяна на климата UNFCCC и CORINAIR-Методика за оценка на атмосферните емисии в Европа и по Конвенцията за трансгранично замърсяване на въздуха на далечни разстояния (CLRTAP).

За изпълнение ангажментите на Република България по Конвенцията за трансгранично замърсяване на въздуха на далечни разстояния, Изпълнителна агенция по околнна среда при Министерство на околната среда и водите и Националния статистически институт ежегодно извършват инвентаризация на емисиите на вредни вещества в атмосферния въздух. Резултатите се използват за докладване на общите годишни национални и секторни емисии пред Секретариата на КТЗВДР, пред Европейската агенция за околнна среда, пред ЕК по отношение прилагането на Директива 2001/81/ЕС за националните тавани за емисии, както и пред Европейския регистър на емисиите. Инвентаризацията се извършва по методика, базирана на Ръководството CORINAIR на EAOC.

I.3.5. Емисионно моделиране:

Всички транспортни химични модели изискват входните емисии да са в определен формат и да отразяват еволюцията във времето на всички замърсители, които са включени в съответния химичен механизъм. Тези изисквания са в сила и при подготовката на входните емисионни данни за химичния транспортен модел CMAQ.

Обикновено инвентаризацията на емисиите е на годишна база за големи територии (общини, окръзи, държави) и замърсителите се изчисляват на групи (фамилии) - CH₄, CO, NH₃, VOC, NO_x, SO_x, PM. При подготовката на файловете с емисиите за химичния транспортен модел е необходимо цялата първична информация в сиров вид, зададена по общини и други населени места да се интерполира в съответната избрана мрежа. За всяка точка от мрежата се задава скоростта на емилиране от клетката с център точката от мрежата. Друга важна необходимост е налагането на времеви профили, които да модифицират годишните стойности, така че да могат да се отчитат сезонните и дневните вариации. Необходимо също така е емисиите от отделните групи (NO_x, SO_x, PM) да бъдат преобразувани или разцепени в по-голям брой компоненти, понеже такива са изискванията при използването на CMAQ модела. Такъв вид разцепване на емисиите на повече компоненти се нарича "speciation" (Гаджев Г., 2013).

Както вече беше споменато емисионните данни са годишни стойности за всеки емисионен източник и е необходимо тези данни да са на часова база за всяка клетка от мрежата. SMOKE модела преработва емисионните данни за времеви, химични и пространствени нужди като необходим вход за моделите за качеството на въздуха. Източниците, които модела SMOKE поддържа са Площни (Area Sources), Мобилни (Mobile Sources), Точкови (Point Sources) и Биогенни (Biogenic Sources) източници. Антропогените емисии се включват в Площните и Точковите източници и са разделени в SNAP категории. Всеки от различните типове източници се третира по специфичен начин. Емисиите от

транспорта също са отделна категория, но поради начина на инвентаризирането им в България те се обединяват с площните източници.

За целите на настоящото изследване времевите вариации на емисиите са изчислени на базата на дневни, седмични и месечни профили предоставени в (Buitlesetal., 2003, Schaapetal., 2008). Тези времеви профили са специфични за държава, замърсител и относно SNAP категория (Selected Nomenclature for Air Pollution).

Процедурата по разцепването - "speciation" е зависима от използвания химичен механизъм. **CMAQ** поддържа различни химични механизми. За целите на озоновото моделиране най-често се използва Carbon Bond v.4 - **CB4** (Geryetal., 1989). Основата на **CB4** механизма е реактивността на органичните компоненти в атмосферата може да бъде симулирана добре от различни механизми представящи различни типове въглеродни връзки. От времето на публикуването **CB4**, са направени няколко промени. По-специално, добавена е химия на **PM**.

Разцепването е специфично за държави и по категории източници (SNAP). В подготовката на файла с емисиите, тези 25 съединения трябва да бъдат комбинирани в горните блокови замърсители в зависимост от използвания химичен механизъм следвайки съответните процедури.

Разработен беше специфичен подход за осъществяване на това разцепване (speciation). Предлага се за целите на прогноза нивата на озона в нашата страна да се следва технологията разработена от US EPA Emission Factor and Inventory Group (Ryan, R., 2002). Входната информация, необходима за изчисляване на емисиите са мрежови данни за площните източници (Area Sources – AS), за мощните точкови източници (Large Point Sources – LPS) и данни за характера на земната повърхност (Land Use), необходими за моделиране на естествените (или биогенни) източници (BgS). Последните еmitират органика, CO и NO и стойностите им зависят силно от метеорологичните условия, включително слънчевото греене.

Данните за площните източници захранват специално създадената програма **AEmis**, която извършва разцепването (speciation) и налагането на времевите профили за всяка клетка от мрежата за всеки SNAP, за съответните юлиански дати. Получените часови стойности на всичките 22 (CH_4 , CO, NH_3 , 10 типа VOC, NOx, SOx, PMC и 5 типа PM2.5) се записват във файл в NetCDF формат.

Базата данни LPS съдържа данни само за 4 SNAP сектора – 1, 3, 4 и 8. Тази информация, заедно с изхода на MCIP се подават на **LPS-процесора** на **SMOKE**, който произвежда съответния емисионен файл. За целта инвентаризацията на мощните точкови източници се трансформира в изисквания от **SMOKE** IDA-формат. В този файл, наред с инвентаризационните данни, влизат и редица параметри на източниците като географски координати, височина и диаметър на комина, скорост и температура на изхвърляне на замърсителите и др. Моделът не само извършва специация и времева алокация, но и изчислява т.нар. "plume-rise" изхвърлянето на замърсителите във височина в резултат от механичния импулс и архимедовите сили. Това нарастване на височината на струята зависи съществено и от метеорологичните условия – вятър и устойчивост на атмосферата. В резултат **SMOKE** произвежда 3D-файл – замърсителите се изхвърлят на различни нива (нивата съвпадат с вертикалната структура на **CMAQ**).

I.4 Грид моделиране

Изследванията ще бъдат провеждани с използване на най-съвременни мезомащабни динамични модели, както и на такива за качество на въздуха. За получаване на надеждни полета на параметрите на въздушната среда и градската въздушна среда се налагат ансамблови симулации с вариране на много параметри и оценка на чувствителността на получените резултати. Нещо повече, симулациите трябва да бъдат направени за изчерпателен набор емисионни сценарии за да се изясни приносът на различните по тип източници на замърсяване върху качеството на въздуха. Изследване от този тип изисква много големи компютърни ресурси - високопроизводителни компютърни платформи (компютърни кълстери, Грид, суперкомпютри), и оптимална организация на числени експерименти и потока на данни като изчислителни платформи. (Foster J., C. Kesselmann, 1998, Atanasov et al., 2006, Ganev et al., 2009, Todorova et al., 2010)

Изискванията за компютърни ресурси на моделите WRF, SMOKE и CMAQ са доста големи. Поради това числени експерименти бяха организирани в ефективна HPC среда като изчисленията се изпълняват на суперкомпютър на кълстера HPC в ИИКТ-БАН (Intel Xeon E5-2650v2 процесори и 64GB RAM). Симулациите за домейни D2, D3 и D4 и тези, за D5 бяха организирани в отделни работни места (джобове), което позволи времето за изпълнението на един джоб от 24 часа, да бъдат симулирани 6 дни.

Изходните данни от моделите, обаче са твърде големи. Не цялата информация от изходните файлове е толкова ценна и се налага допълнителна обработка на данните и съответния софтуер за да може информацията да се "фильтрира" и само необходимата такава да се запази. В изхода от модела CMAQ се запазват часовите данни за повърхностните концентрации на следните най-важни замърсители:

- NO₂, NO, O₃, NO₃, OH, HO₂, N₂O₅, HNO₃, HONO, PNA (Peroxynitric acid), H₂O₂, CO, FORM, ALD2, C₂O₃, PAN (Peroxyacetyl nitrat), PACD (Peroxyacetic acid), PAR, OLE, FACD (Formic acid), AACD (Acetic Acid), ETH, TOL, CRES (Cresol), TO2, XYL, MGLY (Methylglyoxal), ISOP, ISPD (Products of isoprene rxns), SO₂, SULF (H₂SO₄ Sulfuric acid), UMHP (Methanediol), TERP, NH₃ (gases34)
- PSO₄, PNH₄, PNO₃, POA, PEC (aerosol—5)
- SOAA, SOAB (Anthropogenic and Biogenic secondary organic aerosol—2)
- FPRM, CPRM (fine and coarse PM—2).

Симулации за WRF /CMAQ са извършени ден за ден за период от 7 години - от 2008 г. до 2014 г. за град София. По този начин е създадена една доста обширна база данни, която би могла да се използва за различни проучвания и съображения, свързани с основните характеристики и произхода на атмосферния състав в град София, включително климат на замърсяване и индекс за качество на атмосферния въздух.

I.5. Достоверност на резултатите от компютърните симулации

Компютърните симулации са извършени със система от модели с доказани симулационни качества. Това, разбира се, не гарантира автоматично достоверността на резултатите от компютърните симулации, защото те зависят от избрани моделни конфигурации и особено от входните данни. Известно е, че емисионните данни внасят голяма неопределеност в компютърните симулации и са, вероятно, основен източник на грешки в симулирания състав на въздуха.

Проверка на симулационните качества на системата (модели и входни данни) вече беше извършена за територията на цяла България и за град София (Гаджев, 2013; Gadzhev et al., 2015, Етрополски 2015, Syrakov et al., 2014, 2015, Georgieva et al., 2014) и показва задоволително съвпадение на данните от измерванията с моделните резултати.

Това добро съвпадение показва, че и резултатите от компютърните симулации по настоящото изследване, особено разглеждани като ансамбъл, са достатъчно надеждни и съответно направените от тях изводи достатъчно добре отразяват основните черти на климата на замърсяването на въздуха в района на град София.

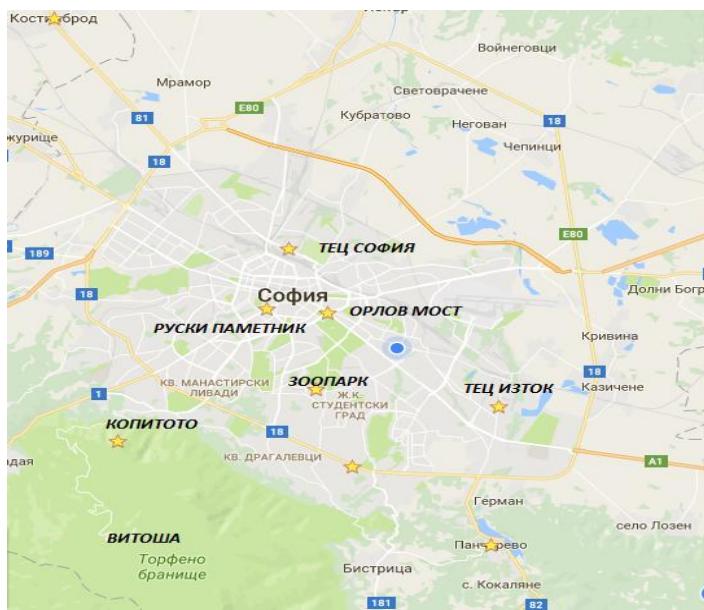
Глава II: Климат на атмосферно замърсяване за избрана градска среда - град София

II.1. Въведение

Изследвания район е град София. Той е избран поради това, че е столица на България и е най-големият град в страната (население: 1 291 591 души; площ: 492 км²) и 15 по-големина град в Европейския съюз. Изследването на замърсяването на въздуха за град София е от голямо значение и поради факта, че столицата е основен туристически, административен, производствен и индустриален център (най-голям за България) с локация на около 800 големи предприятия (около 1/6 от промишленото производство на България-75% от черната металургия, 50% от полиграфическата, 15% от електротехническата и електронната промишленост, 14% от кожухарската и обувната промишленост). София също така е най-големият транспортен център с най-интензивен транспорт. В града са разположение четири Топло Електрически Централи, от които две са основните замърсители на града - ТЕЦ "София" в центъра на града и ТЕЦ "Изток" в кв. Дружба (**Фигура II.1**). Основни замърсители на въздуха в столицата са фините прахови частици и азотните оксиди, които се генерират основно от автомобилния транспорт, отоплението с твърди и течни горива, замърсените пътни настилки и ТЕЦ-те.

При разглеждане климат на замърсяване в градска среда основна роля при проблема със замърсяването на въздуха е географското разположение. София се намира в Софийската котловина, заобиколена от планини (Витоша на юг, Люлин на запад и Стара планина на север), които възпрепятстват възможността за само прочистване на атмосферата. Климатът е умерено континентален със средна годишна температура от около 10°C. (<https://bg.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D0%BE%D1%84%D0%B8%D1%8F#.D0.9A.D0.BB.D0.B8.D0.BC.D0.B0.D1.82>).

На следващата фигура е представена картата на град София. На тази карта освен територията на града са обозначени и по-важни "горещи точки", които при анализиране резултатите от компютърни симулации имат важно значение и се открояват като райони: ТЕЦ "Изток" в кв. Дружба, в югоизточната част на града; село Панчарево; Копитото; Зоопарк София в южната част на града; Орлов мост и Руски паметник - две натоварени пътни кръстовища в централната част на града; ТЕЦ "София" в центъра на града и района на Костинброд в северозападната част.



Фигура II.1 Карта на град София - "горещи точки".

Преобладаваща е антициклонална циркулация, благоприятстваща замърсяването на приземния атмосферен слой и континенталния характер на климата. Характерна, за района, е и локална циркулация, свързана с появата на фъон, северно от Витоша, през студения сезон и планинско-долинна циркулация, характерна за топлия сезон (през деня вятърът духа от полето към планината, а през нощта обратно - от планината към полето). Блокиращият ефект на планина Витоша затруднява процесите на локалната атмосферна циркулация и създава условия за натрупване на маси замърсен въздух до северните склонове

Качеството на атмосферния въздух е функция от въздействието както на климатичните фактори, но и от вида и количествата на еmitирани вредни вещества от разнообразни източници. Нивата на замърсителите в приземния атмосферен слой са динамична величина, зависеща освен от физикохимичните им свойства, също така и от атмосферната циркулация - разсейването, отлагането или задържането на високи концентрации на замърсителите в определен район.

Повторяемостта на комплекс от определени метеорологични параметри създава условия за характерна сезонна или деновощица вариабилност в нивата на някои от атмосферните замърсители. (http://sofia.bg/smet/Programa_OS_1.pdf)

В настоящата глава са разгледани **П.2.** Осреднени полета на приземни концентрации на различни замърсители и **П.3.** Статистически характеристики на приземните концентрации на различните замърсители, като в последната част **П.4.** са обобщени изводите от направените компютърни симулации.

В автореферата по-подробно ще бъдат показани само годишно осреднените двумерни полета на концентрациите и някои статистически характеристики на приземните концентрации.

П.2. Осреднени полета на приземни концентрации на различни замърсители: Годишни средни полета на приземните концентрации на азотен диоксид (NO_2), озон (O_3), серен диоксид (SO_2) и финни прахови частици (FPRM).

За да се направи оценка състава на атмосферата най-лесно и нормално е да се оценят приземните концентрации, още повече, че те са тези, които влияят на човешкото здраве и, в голяма степен, екосистемите. Чрез осредняване върху всички симулирани полета от ансамбъла, са получени средните годишни и сезонни приземни концентрации и тяхното поведение може да се разглежда като "типични" ежедневни модели на концентрациите. Чрез осредняване по целия ансамбъл за различните замърсители са получени средните годишни и сезонни приземни концентрации. Карти на такива годишни полета разглеждани като "типични" са представени за някои замърсителите: азотен диоксид (NO_2), озон (O_3), серен диоксид (SO_2), финни прахови частици (FPRM) и едри прахови частици (CPRM), като в автореферата по-подробно ще бъдат коментирани само годишно осреднените двумерни полета на концентрациите на замърсителите и някои статистически характеристики на приземните концентрации на различни замърсители за София и за отделни точки.

Годишни средни полета на приземните концентрации на азотен диоксид (NO_2)

Азотният диоксид е токсичен при вдишване и има остра и разпознаваема миризма. Този замърсител има вредно въздействие върху хората и се отразява предимно върху дихателните функции. Хронично болните с респираторни инфекции се повлияват неблагоприятно, а хората болните от белодробна астма са с особено чувствителни към повишаване нивото на азотния диоксид. Основните източниците на азотен диоксид са двигателите с вътрешно горене, топлоелектрическите централи, някои промишлени предприятия и други.

С Наредба №9 (ДВ, бр. 46/1999 г., изм. и доп. ДВ, бр. 86/2005 г.) са определени Пределно Допустими Концентрации (ПДК) за азотен диоксид: *Средно Часова Норма (СЧН) - $200\mu\text{g}/\text{m}^3$ (да не бъде превишавана повече от 18 пъти годишно), Средно Годишна Норма (СГН) - $40\mu\text{g}/\text{m}^3$ и Алармен prag - $400\mu\text{g}/\text{m}^3$ (измерени през три последователни часа от съответните АИС и ДОАС):*

От **Фигура П.2.1** в 2 избрана часа се вижда, че максималните стойности на NO_2 се наблюдават в сутрешните часове в района на южните квартали на София и централните части. Максималната стойност е около $200 \mu\text{g}/\text{m}^3$, а минималната около $100 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Тъй като основните източници на NO_2 в града са предимно приземни (автомобилния транспорт), то такива високи стойности на приземните концентрации в сутрешните часове и по-ниски по обяд и следобед, вероятно се дължат, на нестабилността на атмосферата в следобедните часове и интензивният турбулентен транспорт на NO_2 . В обедните и следобедните часове, вече се открояват само 2 точки от града с повищена концентрация и това са Центъра и ТЕЦ „Изток“.

Годишни средни полета на приземните концентрации на озон (O_3)

Озонът е газ състоящ се от три атомна молекула кислород (O_3). Среща се в горната част на атмосферата на 30 - 50 km над земната повърхност и в приземния въздушен слой. В горната атмосфера озоновият слой има защитни функции (защита срещу ултравиолетовите лъчи), а в приземния слой, той може да има неблагоприятно въздействие, защото е силен окислител. Озонът не се еmitира директно в атмосферата, а се формира главно от взаимодействието на азотните оксиди и летливите органични съединения под влияние на високи температури и слънчева светлина. Липсват антропогенни емисии на озон във въздуха. Естествените му фонови стойности във въздуха са около $30\mu\text{g}/\text{m}^3$, но могат да стигнат

много по-високи стойности (напр. $120\mu\text{g}/\text{m}^3$). Озона също влияе неблагоприятно на човешкото здраве - при проникването му в дихателната система, той оказва токсичното си въздействие върху нея. Ефектите от действието му се състоят във възпаление на респираторните органи, намаление на функционалността на белия дроб, съпроводени с ускорено дишане, намаляване устойчивостта към респираторни заболявания и отслабване на имунната система. Хората с астматични заболявания и такива, които работят на открито са в най-рисково влияние от озона.

Българското законодателство е регламентирало ПДК за озон в атмосферния въздух с Наредба № 8 (ДВ, бр. 46/1999 г.), Наредба № 4 (ДВ, бр. 64/от 5 юли 2004 г.) - за норми за озон и алармени прагове за нивата на озон в атмосферния въздух: (<http://en.wikipedia.org/wiki/Ozone>) : *Праг за информиране на населението (СЧН) - $180\mu\text{g}/\text{m}^3$ (измерена през три последователни часа) и Праг за предупреждение на населението (СЧН) - $240\mu\text{g}/\text{m}^3$ (измерени през три последователни часа).*

От **Фигура II.2.1** се вижда, че сутрин концентрациите на озон са много малки над града. С напредването на деня и греенето на слънцето, се забелязва как концентрациите на озона се повишават и като, че ли обгръщат територията на града. Напълно естествено, най-големи стойности се наблюдават в следобедните часове около и над планините, а по територията на София те са по-малки.

Озона в България до голяма степен се дължи на транспорт от чужбина (Gadzhev et al. (2012, 2013 a,b,c,d)), това е и една от причините, защо озоновите концентрации са ниски през сутрешните часове спрямо тези от обяд и следобедните – по-слабо изразен интензивен транспорт на озон от високите нива. Друга причина за разпределение на концентрациите в градски район е вероятно е озоновата фотохимия, която обяснява, както високите концентрации през деня и през топлите месеци, така и „озоновите дупки”, които се образуват на местата, където концентрациите на NO_2 са големи.

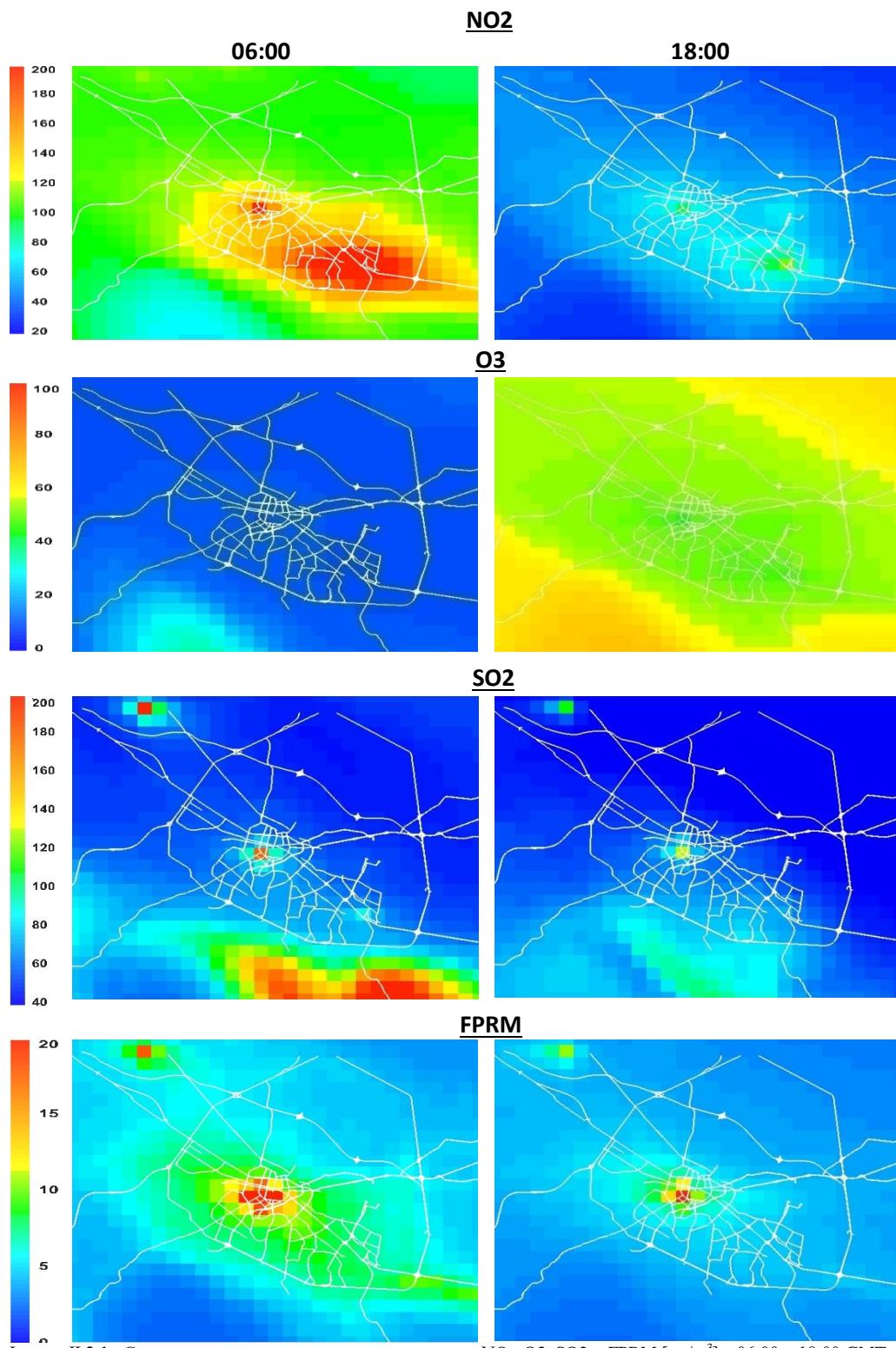
Годишни средни полета на приземните концентрации на серен диоксид (SO_2).

Серният диоксид е от групата на серните оксиди (SO_x), които се формират при изгаряне на горива с високо сърно съдържание. Енергетиката е най-големият източник на серен диоксид – 93,9% от общото еmitирано в страната количество. Основен антропогенен източник на серен диоксид са ТЕЦ-те и битовите източници (изгарянето на природни горива). Други източници на замърсяване със серен диоксид са двигателите с вътрешно горене, металургията и химическата промишленост.

Серния диоксид може да попадне в организма чрез респираторната система и да окаже влияние върху човешкото здраве. При попадане на високи концентрации в организма, 90% от него се абсорбира от горните дихателни пътища. Деца, възрастните, хората с астма и сърдечносъдови заболявания или хронични белодробни заболявания са особено чувствителни към високите нива на серен диоксид. Като здравни ефекти върху здравето се проявяват нарушение на дишането, белодробни заболявания, нарушение на имунната защита на белия дроб.

С Наредба №12 от 15 юли 2010 г. (обн. ДВ, бр. 58 от 30 юли 2010 г.) са определени ПДК за серен диоксид. (<http://eea.government.bg/bg/output/daily/pollutants/s2o.html>): *Средно Часова Норма (СЧН) - $350\mu\text{g}/\text{m}^3$ (да не бъде превишавана повече от 24 пъти годишно), Средно Дневна Норма (СДН) - $125\mu\text{g}/\text{m}^3$ (да не бъде превишавана повече от 3 пъти годишно) и Алармен праг - $500\mu\text{g}/\text{m}^3$ (измерени през 3 последователни часа от съответните АИС и ДОАС).*

От **Фигура II.2.1** се вижда, че високи концентрации се наблюдават най-вече в сутрешните и обедните часове в района на Панчарево и сутрин се забелязва района на Костинброд в западните покрайнини на града. В следобедните и вечерните часове, концентрациите намаляват, като през нощта се забелязват само в подножието на Витоша планина. На картите се вижда, че максималните приземни концентрации на SO_2 са предимно в районите на Центъра, Панчарево и подножията на Витоша планина. В районите на село Панчарево и в селата в подножието на Витоша, вероятни източници на серен диоксид, са домакинствата отопляващи се на твърдо гориво, което е една от причините за тези високи концентрации в района. Възможна причина са и особеностите на циркулацията, обусловена от характеристиките на релефа. В централните райони, основен източник на серен диоксид е ТЕЦ "София".



Фигура II.2.1.: Средно годишни приземни концентрации на NO₂, O₃, SO₂ и FPRM [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] в 06:00 и 18:00 GMT.

Годишни средни полета на приземните концентрации на финни прахови частици (PRM).

Един от основните замърсители на въздуха е праха. Основни източници на прах са промишлеността, транспорта и енергетиката и тя естествено има вредно влияние върху човешкото здраве. Това влияние зависи главно от размера и химичния състав на праховите частици. По-едрите прахови частици (**от 2.5 μm до 10 μm - PM10 или CPRM**) при попадане в организма чрез дихателната система, се задържат в горните дихателни пътища, а по-финните (**под 2.5 μm - PM2.5 или FPRM**) достигат до по-ниските отдели на дихателната система и водят до увреждане на тъканите в белия дроб. Особено

чувствителни към високи стойности на **PM10** са децата, възрастните и хора с хронични белодробни заболявания, грип или астма.

С Наредба № 9 (ДВ, бр. 46/1999 г.), (изм. и доп. ДВ, бр. 86/2005 г.) са приети норми за пределно допустими концентрации (ПДК) за фини прахови частици. Въведените ПДК целят предпазване от техния вреден ефект върху здравето на хората и околната среда. (<http://eea.government.bg/bg/output/daily/pollutants/pm.html>):

Едри прахови частици (CPRM) (от 2.5 μm до 10 μm): Средно Дневна Норма (СДН) - 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (да не бъде превишавана повече от 7 пъти годишно) и Средно годишна Норма (СГН) - 40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$

Финни прахови частици (FPRM) (под 2.5 μm): Средно Дневна Норма (СДН) - 40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (да не бъде превишавана повече от 14 пъти годишно) и Средно годишна Норма (СГН) - 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

През цялото денонощие се забелязват концентрации на FPRM около 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ в Центъра на града (**Фигура II.2.1**). В сутрешните часове се забелязват и концентрации в южните части на града около 10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. През цялото денонощие се откроява и района на Костинброд. Високите сутрешни концентрации вероятно се дължат на стабилността на атмосферата и възпрепятствания турбулентен транспорт, както и интензивен автомобилен трафик.

При средно годишните приземни концентрации на едрите прахови частици (CPRM) на най-големи са стойностите в сутрешните и следобедните часове, както и през нощта. Местата на, които са тези максимални стойности са Центъра на града и околностите му, както и района на Костинброд. Максималните концентрации са около 100 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

II.3.Статистически характеристики на приземните концентрации на различните замърсители на територията на град София и за отделни точки.

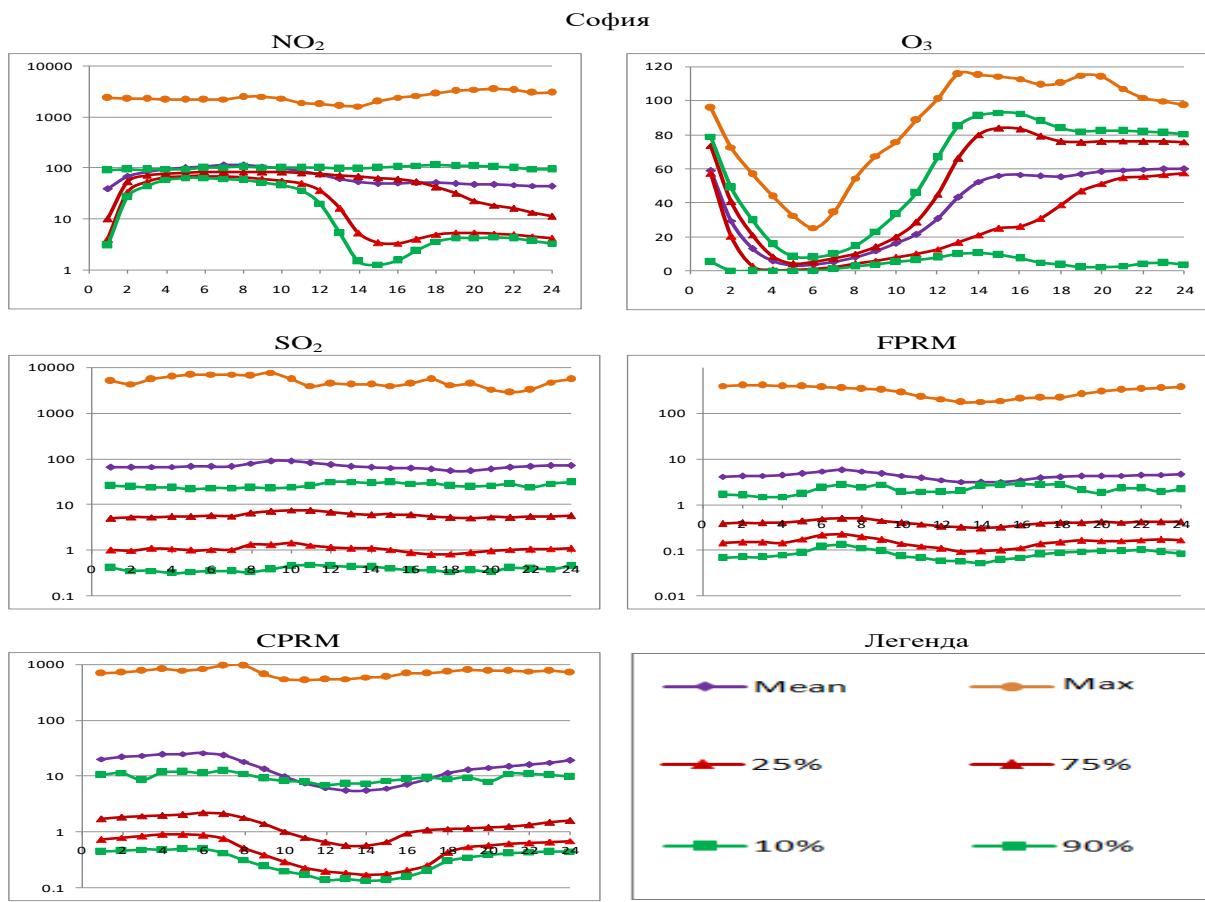
Компютърно симулирания седем годишен ансамбъл е достатъчно голям и изчерпателен за да позволява разнообразни статистически обработки. Представените средногодишни концентрации на някои замърсители в глава **II.2.** не изчертават информацията, която може да бъде извлечена от ансамбъла, а биха могли да се изчислят различни статистически характеристики, както за цялата област София град, така и за избрани точки.

Статистическите характеристики, които могат да се изчислят са дисперсия, абсолютните минимални и максимални концентрации, процент на средните стойности в даден интервал от всички стойности на ансамбъът, плътността на вероятността, асиметричност, ексцес/куртозис (височина на върха на нормалното разпределение) и други.

В глава **II.3.1 - II.3.6** в дисертацията са представени графики показващи основни ансамблови характеристики на замърсяването, а именно сезонни и годишни характеристики за някои замърсители (NO_2 , O_3 , SO_2 , FPRM, CPRM), осреднени за цялата област София град и в някои подбрани отделни точки от областта (Площад Руски паметник, Орлов мост, ТЕЦ „Изток”, Зоопарк, Копитото). Графиките на други подбрани точки от областта са представени **Приложение II.3.** В автореферата ще бъде представен един пример за статистическите характеристики на годишно осреднените приземни концентрации на някои замърсители в гр. София **Фигура II.3.**

На всички графики са изобразени средните концентрации, максимални по ансамбъл концентрации и кривите обозначени с 10%, 25%, 75% и 90%. Тези криви представляват мислени концентрации, за които съответно в 10%, 25%, 75%, 90% от случаите са били симулирани по-ниски концентрации. При така представените криви в интервала между 25%-75% попадат 50% от случаите, а в интервала 10%-90% попадат 80% от случаите. Изобразените по този начин криви дават достатъчно добра представа за статистическите характеристики на ансамбъла – дисперсия, асиметрия, ексцес, без да бъдат показани явно.

Графиките за NO_2 , SO_2 , FPRM и CPRM са представени в логаритмична скала, поради големите стойности на абсолютните максимални концентрации и невъзможността да се разгледат интервалите от случаи с дадени концентрации на една графика с абсолютните максимални такива. Абсолютните минимални концентрации са, в повечето случаи, близки до нула, така че те не са показани на логаритмичните графики.



Фигура П.3.: Статистическите характеристики на годишно осреднените приземни концентрации на някои замърсители в София

Годишно и сезонно осреднени концентрации на азотен диоксид (NO_2) за София показват, че средните концентрации имат добре изразен деновощен ход с максимум в сутрешните часове и минимум в следобедните. Средните концентрации следват 75% крива, като по скоро попадат в 80% интервал от случаи (между двете зелени криви 10%-90%). Средните концентрации са асиметрично разположени в различните отрязъци от броя случаи както през деновощиято, така и през различните сезони. Сезонният ход показва, че абсолютните максимални концентрации на азотен диоксид са най-високи през есента и зимата, което вероятно се дължи на по-често устойчивата атмосфера и възпрепятствания турбулентен транспорт на NO_2 във височина.

Годишно и сезонно осреднени концентрации на озон (O_3) за София показват, че средните концентрациите са с добре изразени деновощен и сезонен ход. Озонът има добре изразен максимум през деня в следобедните часове, който е свързан с ниските стойности на NO_2 по това време на деновощиято и ускорените фотохимични реакции. През сутрешните часове има добре изразен минимум в вероятно дължащ се на по-слабо изразен транспорт на озон от по-високите нива. Средните концентрации се разпределят в интервала съдържащ 50% случаи и са симетрично разположени в различните отрязъци от броя случаи през деновощиято и през различните сезони. Средните и абсолютните максимални концентрации са най-високи през пролетта и лятото, което вероятно се дължи на фотохимичните трансформации и неустойчивата стратификация през топлите месеци (спускането от височина на озон към приземния слой).

Годишно и сезонно осреднени концентрации на серен диоксид (SO_2) за София показват, че средните концентрации имат много слabo изразен деновощен ход с максимум около обяд и попадат в 80% интервал от случаи през пролетта и лятото и над него през студените месеци, като са най-близо до кривата 90% и са асиметрично разположени в различните отрязъци от броя случаи както през деновощиято, така и през различните сезони. Абсолютните максимални и средните концентрации са най-високи през есента и зимата, като през студените месеци средните концентрации са по-големи от 90% от случаите. Вероятна причина за това, е че именно тогава е най-голямо производството на емисиите от енергетиката и отоплението както и метеорологичните условия (устойчивата стратификация).

Годишно и сезонно осреднени концентрации на финни и едри прахови частици (FPRM/CPRM) за София показват, че средните концентрациите са с добре изразени денонощен и сезонен ход и са асиметрично разположени в различните отрязъци от броя случаи през денонощието и през различните сезони. Средните концентрации попадат в интервала съдържащ 80% случаи през топлите месеци и над него през есента и през зимата съвпадат с 90% кривата. Абсолютните максималните и средни концентрации са най-високи през есента и зимата (устойчивата стратификация). В сутрешните часове има добре изразен максимум, както е и при NO_2 и минимум около обяд за FPRM.. Вероятна причина за този максимум са стабилната атмосфера и интензивния автомобилен транспорт сутрин. При CPRM има добре изразен минимум през деня и максимум вечер. Абсолютните максималните и средни концентрации са най-високи през есента и зимата (устойчивата стратификация). Източници на едри прахови частици са енергетиката и локалното отопление, които са най-интензивни през по-студените месеци .

II.4. Изводи

От представените полета на концентрациите на различните замърсители могат да се направят следните изводи:

Местата и районите по територията на град София, които се открояват с високи концентрации на всички замърсители са Южните части на града, Централните части, ТЕЦ "Изток" и района на Костинброд (западна част на София).

Големи стойности на концентрациите на NO_2 се наблюдават в Центъра, ТЕЦ "Изток" и Южните квартали, като средно годишна норма се превишава в районите на ТЕЦ "Изток" и ТЕЦ "София". Над планините - Витоша, Люлин, Стара планина и Лозен, концентрациите на почти всички замърсители са най-ниски с изключение на озона (O_3), който има най-високи концентрации там. Озоновите концентрации не превишават определените ПДК.

Най-големи концентрации на серен диоксид (SO_2) се наблюдават в района на Панчарево и подножието на Витоша, както и района на Костинброд.

Полетата на концентрациите на праховите частици (FPRM/CPRM), както на финните така и на едрите са високи в Централните части и Южните квартали на София. Като отделно място с висока концентрация се откроява и района на Костинброд в западните покрайнини. На места в споменатите райони на високи концентрации се достигат определените ПДК за финни прахови частици (около 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$), докато едрите прахови частици превишават ПДК в Центъра на града и района на Костинброд.

От Статистически характеристики на замърсителите за София и за отделни точки изводите са:

Денонощният и сезонният ход е добре изразен за всички точки.

Средните концентрации на NO_2 , SO_2 и FPRM/CPRM. са асиметрично разположени в различните отрязъци от броя случаи както през денонощието, така и през различните сезони. Средните концентрации на тези замърсители попадат в 80% интервал от случаи. Почти за всички замърсители ивицата 25%-75% попада под средното за съответния случай. Тези на NO_2 следват 75% крива, като по скоро попадат в 80% интервал от случаи, като в сутрешните часове средните концентрации надвишават 90% крива.

Средните концентрации от графиките на SO_2 , FPRM и CPRM през пролетта и лятото следват 90% крива, като попадат в интервала 80% от случаите, докато през студените месеци дори са по-големи от 90% крива. Фактът, че в много случаи линията на средните концентрации попада дори над линията 90% показва, че в останалите 10% от случаите концентрациите са изключително високи.

Средните и абсолютните максимални концентрации на NO_2 , SO_2 , FPRM и CPRM са най-високи през есента и зимата (устойчивата атмосфера и слаб турбулентен транспорт във височина).

Средните концентрации на O_3 се разпределят в интервала съдържащ 50% случаи и са симетрично разположени в различните отрязъци от броя случаи през денонощието и през различните сезони. Средните и абсолютните максимални концентрации на озона също имат добре изразен денонощен и сезонен ход с максимум през топлите месеци и около обяд и с минимум в сутрешните часове. Това вероятно се дължи на слабо изразен транспорт на озон от по-високите нива сутрин и стабилността на атмосферата.

Прави впечатление много високите максимални стойности на концентрациите за повечето замърсители с изключение на озона. Трябва да се има предвид, че тези стойности се получават за всяка отделна точка и част от денонощието в различни дни и както се вижда от графиките 90% от случаите, концентрациите са много по-малки. Анализът на конкретните метеорологични условия при които тези екстремни концентрации се получават, ще бъде обект на по нататъшни изследвания.

Средните по ансамбъл концентрации, са получени и с отчитане на екстремно високите концентрации. Една друга възможна характеристика на ансамбъла са най-вероятните концентрации, които както се вижда и от графиките ще бъдат по-ниски от средните. Определянето на най-вероятните концентрации също ще бъде обект на по нататъшна обработка на ансамбъла.

Глава III: Индекс за качеството на атмосферния въздух за град София.

III.1. Въведение

Атмосферният въздух е жизнената среда на човека, който има огромно значение за качеството на живот и човешкото здраве. Въздухът, който ни заобикаля и дишаме е сложна смес от широк спектър от замърсители, свързани по сложен начин, които влияят на качеството на живот. Поради това влияние се определя качество на самия въздух като мярка за състоянието на въздуха спрямо изискванията на една или повече биологични видове. Качество на въздуха (AQ) е ключов елемент за благосъстоянието и качеството на живот на европейските граждани. Асоцииране между повишената честота на дихателната, сърдечно-съдови, неопластични заболявания, намалената продължителност на живота и замърсяването на въздуха е енергично установен (Brunekreef B, Holgate S 2002), (Atkinson et al., 2012). Според Световната здравна организация (СЗО), замърсяването на въздуха силно се отразява на здравето на европейските граждани (СЗО, 2000, 2004), между 2.5 и 11% от общия брой на смъртните случаи се дължат на замърсяването на въздуха). Действащото законодателство (Директива 2002/3/2008 ЕС) изиска информиране на обществеността за качеството на въздуха, за оценка на концентрациите на замърсители на въздуха над цялата територия на държавите-членки и показва превишенията на пределно допустимите стойности (ПДК) и целеви стойности, прогнозира потенциални превишения и оценката на възможните аварийни мерки за намаляване на превишенията, използвайки инструменти за моделиране. Качеството на въздуха се определя, като се конструира Индекс за качеството на въздуха (AQI), който да показва до каква степен е чиста или замърсена средата, която дишаме и какви биха били последиците за здравето на хората. Индексът за качеството на атмосферния въздух е съставен и се измерва, за да се определи състоянието и качеството на въздуха, спрямо широкия кръг от замърсители от който е съставен. Основна функция на индекса за качеството на въздуха е оповестяването на реалното състояние на въздуха и обобщаването му в една цифра (например, изразена като цветна пиктограма или като код), като се дава възможност да се опише по един прост и разбираем за хората начин.

В глава III.2. е описан използванятия в настоящата работа Индекс за качеството на атмосферния въздух, в глава III.3. са представени резултати от числени симулации направени за определяне индекса за качеството на атмосферния въздух както и анализ на неговото пространствено - времевото поведение за град София. В глава III.4. са представени изводите от представените резултати.

В автореферата ще бъдат показани и коментирани само годишно осреднените двумерни полета на повтаряемостта на индекса за качеството на атмосферния въздух за град София.

III.2. Индекс за качеството на атмосферния въздух

Индексът за качеството на атмосферния въздух дава интегрална оценка на влиянието на цялата съвкупност от замърсители върху човешкото здраве и се изчислява на базата на концентрацията на различните замърсители получена от измерване или числено моделиране. Представянето на информация за реалното качество на въздуха се осъществява чрез преобразуване на концентрацията на замърсителите в индекс, който се определя за всеки замърсител поотделно и по различен начин. След преобразуването на концентрацията в индекс, се образува безразмерна скала, в която попада индексът и е свързана с интуитивен цветен код (напр. от зелено до червено) и лингвистично описание (например от много добро до много лошо).

Индексът на замърсяване се определя в няколко интервала, за всеки от които е линейна функция на концентрацията на съответните примеси (EPA, 2009):

$$I = \frac{I_{high} - I_{low}}{C_{high} - C_{low}} (C - C_{low}) + I_{low} \quad (\text{III.2.1})$$

където: I = индекс на замърсяване, C = концентрация на замърсителя, C_{low} = добра гранична стойност на концентрацията C , C_{high} = горна гранична стойност на концентрацията C , I_{low} = добра граница на индекса съответстваща на C_{low} , I_{high} = горна граница на индекса съответстваща на C_{high}

Така изчисления индекс на замърсяване попада в някой от диапазоните на безразмерната скала. Образуването на безразмерна скала се прави спрямо стойностите на индекса на замърсяване, които се разделят на диапазони. Във всеки диапазон стойностите на индекса са свързани с определен цветен код, лингвистично описание и препоръка касаеща човешкото здраве.

В различните държави и организации се конструират различни индекси и скали описващи замърсяването на въздуха и влиянието му върху човешкото здраве, като се взимат за база различни замърсители: За страните от Европейския съюз в рамките на проекта CITEAIR беше разработен Общ Индекс на Замърсяване, който различава часови, дневен и годишен индекс. (<http://www.citeair.eu/>)

Часовия и дневен индекси имат 5 нива използвайки скала от 0 (много слабо) до > 100 (много силно) в относителни единици от концентрацията на замърсителите. Базират се на три замърсителя, които са най-значими за Европа – PM₁₀, NO₂ и O₃. Могат да се използват в допълнение следните примеси: CO, SO₂ и PM_{2,5}. Пример за легендата използвана при общия индекс на замърсяване в Европа е представен на Таблица III.2.1.

Таблица III.2.1: Общ Индекс на Замърсяване - легенда

Замърсяване	Стойност
Много слабо	0/25
Слабо	25/50
Средно	50/75
Силно	75/100
Много силно	>100

Общият годишен индекс се изчислява по различен метод, като представя отклонението от така наречената гранична стойност извлечена от Европейските директиви за годишни стандарти на въздуха. Когато този индекс е по-голям от 1 това означава, че за един или повече замърсители граничната стойност не е достигната, т.е. има превишение на съответния стандарт. Ако индексът е по-малък от 1 това означава, че граничната стойност е достигната т.е. няма превишение на съответния стандарт за нито един от замърсителите. Този индекс представя излагането на вредното влияние на замърсяването за по-дълготраен период и е свързан с препоръките за опазване здравето на населението направени от Световната Здравна Организация (СЗО).(http://www.airqualitynow.eu/about_indices_definition.php)

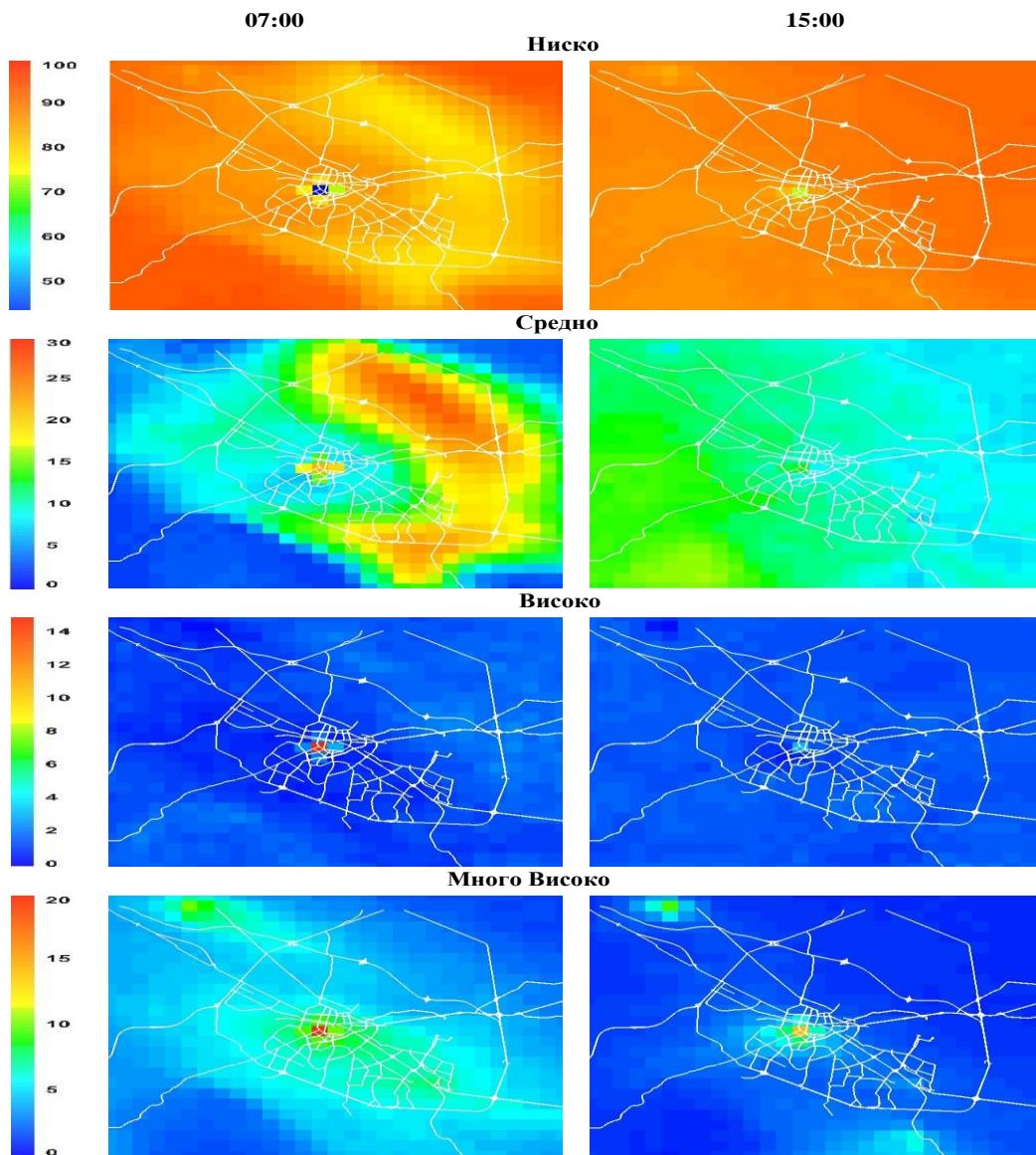
Често използван Индекс за замърсяване е Британският индекс за качество на атмосферния въздух (Leeuw, F. de, Mol, W., (2005)). Той се използва и в България в рамката на Българската Система за Прогноза на Химичното време (Syrakov et al., 2009, 2011a,b, 2012, Etropolska et al, 2010). Този индекс е конструиран на 10 нива, които са разпределени в 4 категории: **Ниско, Средно, Високо и много високо**. Индексът на замърсяване се базира на концентрациите на 5 замърсителя: Озон (O₃), Азотен диоксид (NO₂), Серен диоксид (SO₂) и Прахови частици (PM_{2,5}, PM₁₀). Граничните стойности между индекса се определят за всеки замърсител поотделно и общия индекс се определя като се вземе максималната стойност на индекса. Референтните нива използвани при образуването на такива таблици и скали са свързани с директивите за граничните нива за опазване на човешкото здраве, определени от Европейския Съюз и/или от Световната Здравна Организация (WHO 2005).

III.3. Анализ на пространствено - времевото поведение на индекса за качество на атмосферния въздух за град София

Както вече беше споменато в България се използва Британският индекс на замърсяване в рамката на Българската Система за Прогноза на Химичното време (Syrakov et al., 2009, 2011a,b, 2012, Etropolska et al, 2010). Индексът е съставен на 10 нива, като са разпределени в 4 категории: **Ниско, Средно, Високо и Много Високо**.

Пространственото и времево поведение на индекса за качество на въздуха за град София е определен като всички симулации са представени като сума на всеки индекс във всяка една от категориите - Ниско, Средно, Високо и Много високо. В категорията "Ниско" въздуха е най чист, което означава, че високи стойности при полетата с повторяемостта на дните с даден индекс за качеството на въздух, показват повече случаи с чист въздух, а ниските стойности означават по-малко случаи с чист въздух, респективно – повече случаи със замърсен въздух. При останалите категории Средно, Високо и Много Високо, високите стойности показват повече случаи със замърсен въздух, а ниските – повече случаи с чист въздух.

Представени са годишно осреднени полета (**Фигура III.3.1**) на повторяемостта в проценти на индекса на замърсяване в 4-те категории - Ниско, Средно, Високо и Много Високо за град София в два избрани часа (07:00 и 15:00 GMT), с цел да се обхванат пиковите часове на интензивен транспортен трафик.



Фигура III.3.1: Повтаряемост на ИКВ в 4-те категории - годишно осреднена за град София

През пролетта по-малка повтаряемост на дните с Индекс на замърсяване в категорията "Ниско" се наблюдават в сутрешните часове само в централните части на града в района на Руски паметник, а след обяд около и над Витоша планина. Това може да се проследи и на полетата от категория "Средно" с около 20% повтаряемост в следобедните часове. В категорията "Много високо" се откроява централната част и южните квартали на града с повтаряемост на дните със замърсен въздух около 10 - 15%, както и района на Костинброд в сутрешните часове, когато обикновено атмосферата е стабилна.

През лятото почти навсякъде повтаряемостта на случаите в диапазон "Ниско" е почти 100%, освен около Северната дъга на околовръстния път. В сутрешните часове могат да се видят тези изключения, които надвишават 20% повтаряемост в диапазон "Средно", а след обяд около и над Витоша планина, както и повтаряемост около 15% над целия град. Това замърсяване се дължи на по-високата концентрация на озон в планинските райони и интензивен транспорт от по-високи нива при интензивна атмосфера в обедните часове. Повтаряемостта на случаите с най-замърсен въздух е сравнително висока (около 20%) и се наблюдава в центъра на града (в близост до Руски паметник) рано сутринта. Високата повтаряемост на индекса в диапазоните "Средно" и "Високо" през сутрешните часове вероятно се дължи на автомобилния транспорт и стабилността на атмосферата, която води до високи концентрации на NO₂ рано сутринта.

През есенните месеци се наблюдава понижено качество на въздуха по Северната дъга на околовръстния път в сутрешните часове, в диапазоните "Ниско" и "Средно", което вероятно се дължи на интензивния транспортен трафик и високите концентрации на NO₂. В категорията "Много високо" се

откроява единствено центъра на София с повтаряемост на дните със замърсен въздух около 20% отново в сутрешните часове.

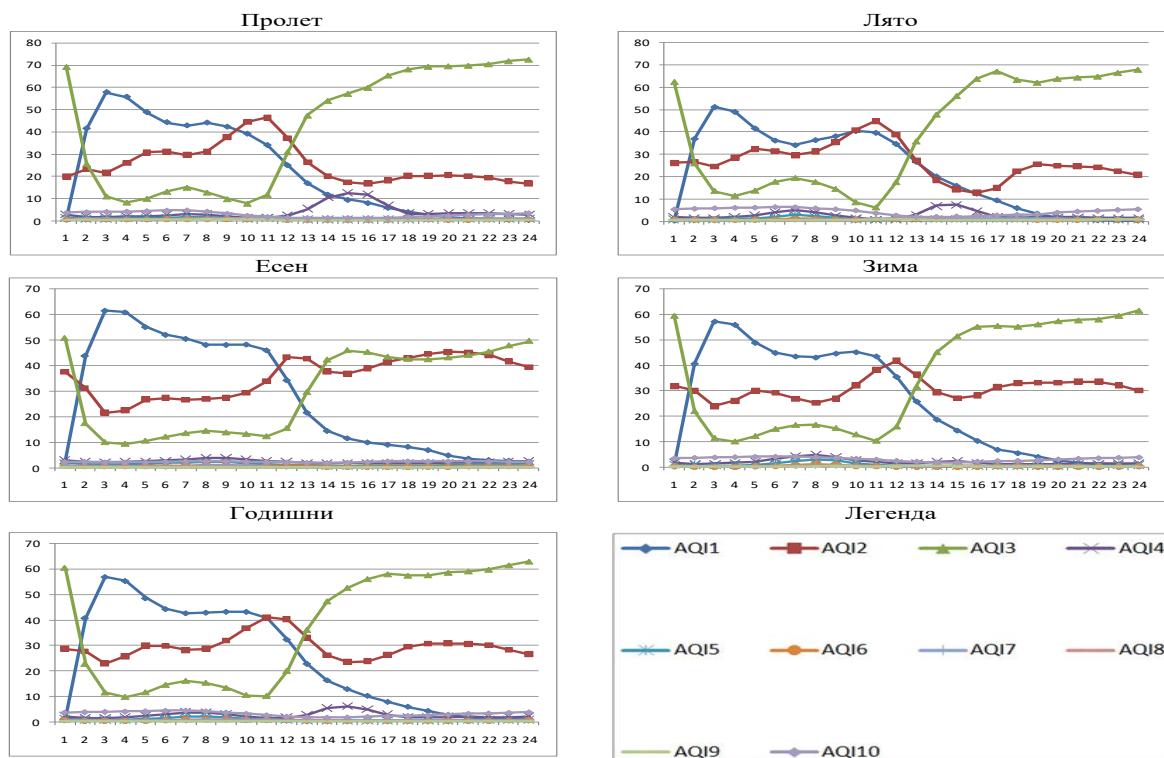
През зимата повтаряемостта на случаите в диапазон "Средно" и "Много Високо" е по-висока сутрин и по обяд. В диапазон "Средно" повтаряемостта е между 15 и 30% почти над целия град. Високото замърсяване в града по обяд се обяснява с по-интензивния трафик и по-стабилната зимна атмосфера, и поради атмосферните условия не се транспортира замърсяването във височина.

Годишно осреднените (Фигура III.3.1) полета на повтаряемостта на дните с определен индекс за качество на въздуха, показват резултати, които напълно естествено следват сезонните полета. В категорията "Ниско", районите със занижен индекс на качеството на въздуха са предимно околовръстната мрежа на града и по-натоварените транспортни трасета, както и централните части, най-вече в сутрешните часове. Това се проследява и в категорията "Средно", рано сутрин с около 20-30% повтаряемост на дни със замърсен въздух. В следобедните часове в тази категория се откроява замърсяване над Витоша планина, което вероятно се дължи на турбулентния транспорт на озон от по-високи нива при турбулентна атмосфера.

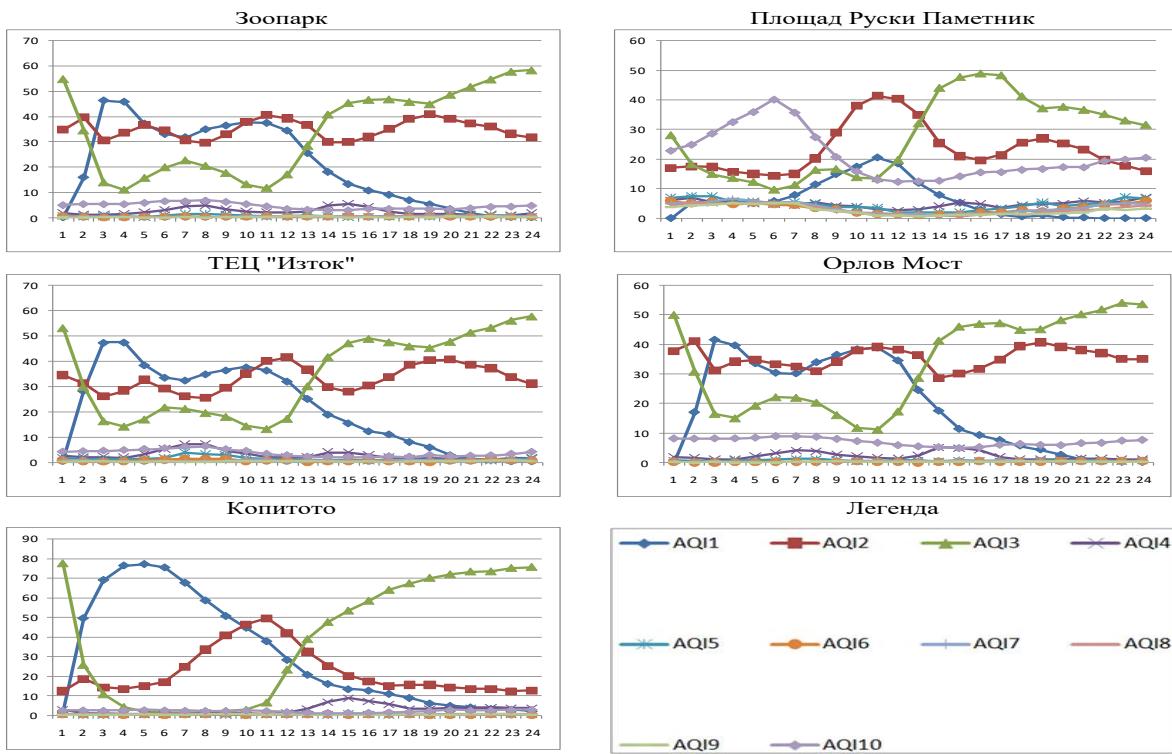
Фигура III.3.2 представя денонощния ход и сезонното разпределение на средните повтаряемости в [%] за различните индекси на замърсяване (от 1 до 10) за територията на град София, както и за различни избрани точки от града – Орлов мост, Площад Руски паметник, ТЕЦ "Изток", Зоопарк и Копитото (Фигура III.3.3) Графиките на останалите извадени точки от София са показани в **Приложение III.3**.

На **Фигура III.3.2** се вижда, че най-голяма повтаряемост през различните сезони имат индексите AQI1, AQI2, AQI3, които попадат в интервал „Ниско“. Денонощния ход на тези индекси е добре изразен. В сутрешни часове повтаряемост от около 40-50% имат AQI1, AQI2, а по това време AQI3 има минимална повтаряемост. През пролетта и лятото в следобедните часове AQI4 има пик с повтаряемост около 10%. През всички сезони се откроява и AQI10, който отговаря на категория „Много Високо“ с около 5% повтаряемост. Останалите индекси имат незначителна повтаряемост.

На **Фигура III.3.3** се вижда, че най-голяма повтаряемост за всички точки имат индексите AQI1, AQI2, AQI3, които попадат в интервал „Ниско“ и AQI4 (категория „Средно“). Денонощния ход на тези индекси е добре изразен. За точките Площад Руски паметник и Орлов мост се откроява и AQI10, който отговаря на категория „Много Високо“ с много висока повтаряемост - около 10% за Орлов Мост и около 30 за Руски паметник. Най-голяма повтаряемост на AQI10 е сутрин и през зимата, което вероятно се дължи на стабилната зимна атмосфера и възпрепятстваното изнасяне на замърсяването във височина. Тези точки се открояват, като едни с най-нисък статус на качеството на въздуха.



Фигура III.3.2: Средни повтаряемости в [%] за различните индекси на замърсяване (от 1 до 10) за територията на град София.



Фигура III.3.3: Годишно осреднени повтаряемости в [%] за различните индекси на замърсяване (от 1 до 10) за различни точки от град София

III.4. Изводи

От фигурите показващи статуса за (ИКВ /AQI) качеството на атмосферния въздух на град София, могат да се заключат следните изводи:

Както в глава II., където бяха показани концентрациите на някои замърсители се откроиха няколко точки, така и при определяне индекса за качеството на въздуха, се забелязват именно тези места по територията на града. Това е напълно естествено имайки предвид, че за да се изчисли и моделира AQI се изисква концентрация на даден замърсител получена от наблюдения или от модел.

На фигурите се откроява Центъра на града със занижен AQI статус, както през цялото денонощие, така и през всички сезони. Това е една от точките с постоянно замърсен въздух.

Северната скоростна тангента и изхода за АМ "Тракия" се открояват с повтаряемост на дните със замърсен въздух около 30%, но въпреки това повтаряемостите попадат в категориите "Ниско" и "Средно".

В категория "Много Високо" попадат Централните части, както и района на Костинброд в западните покрайнини с повтаряемост около 20% на дни със ниско качество на атмосферния въздух.

С оглед на резултатите от полетата показващи повтаряемостта на дните с даден AQI статус в града, бяха разгледани и денонощния ход и сезонното разпределение на средните повтаряемости за различните индекси в някои от споменатите по-горе точки.

На всички фигури се открояват AQI1, AQI2, AQI3, AQI4 като такива с най-голяма повтаряемост за всички точки и всички сезони. Тези индекси попадат в категориите "Ниско" и "Средно".

Притеснителен е факта, че в точките намиращи се в централните части на града - Орлов Мост и Руски паметник, повтаряемостта на AQI10 е висока, като за района около Руски паметник е около 40%. За точките Зоопарк и ТЕЦ "Изток" също се откроява сравнително висока повтаряемост на AQI10, макар и не толкова голяма колкото в централни части на града - около 10%. Този индекс попада в категорията "Много Високо" и високата му повтаряемост се открива предимно в Центъра на София през всички сезони.

Глава IV: Оценка приноса на различните категории източници (SNAP категории) към замърсяването на град София и за отделни точки.

IV.1. Въведение

Качеството на атмосферния въздух в град София освен от физико - географски и метеорологични особености, зависи също от разнообразни антропогенни източници. Градските източници на атмосферно замърсяване са стационарни и мобилни. Стационарните източници в градските райони, се дефинират допълнително в: **точкови** - големи неподвижни източници с един или няколко високи комини; **площи** - малки неподвижни източници (битови източници, производствени сгради, ниски комини).

Голяма част (27%) от територията на град София е заета от производствени дейности, при което значителна част от предприятията, замърсяващи въздуха с токсични вещества, се намират в жилищните зони или в непосредствена близост до тях. Този тип застрояване затруднява ясното разграничаване на промишлените зони, а фактът, че около 34% от производствените територии са разположени до 4 км от центъра на града, допълнително усложнява управлението на качеството на атмосферния въздух в района.

Основните групи антропогенни дейности, имащи отношение към замърсяване на атмосферния въздух в Столицата са :

Промишлени и индустриални дейности - Инвентаризацията на източниците и вредните им емисии идентифицираха отрасловите дейности, имащи пряко отношение към качеството на въздуха в района на София. Те са представени основно от черна/цветна металургия и от централите за производство на топлоенергия (ТЕЦ-те).

Интензивен автомобилен трафик - замърсява въздуха с широка гама от химични съединения: азотни и въглеродни окиси, прахови аерозоли, сажди, серни оксиidi, поликлинични ароматни въглеводороди.

Извършването на *строителни и ремонтни дейности*, в различни райони на града, е свързано с допълнително повишение на концентрациите на супендиран прах и вредни газове от нефтени горива.

Емисиите от МПС замърсяват приземния атмосферен слой на град София с азотен диоксид, докато промишлеността има по-голямо значение за замърсяването със серен диоксид. Основни източници на прах (PM) са в приблизително еднаква степен трафикът, големите индустриални предприятия, битовото или промишлено изгаряне на твърди и течни горива за отопление.

Битови дейности - използването на твърди и течни горива за отопление през зимния сезон в битовия сектор и местните топлоцентрали продължава да бъде от съществено значение за качеството на въздуха в Столична община.

Съществена роля за качеството на въздуха в района на Столицата има интензивният трафик. На второ място, са индустриалните дейности, предимно производството на топлоенергия, електроенергия и дейностите на металургичните предприятия, а с най-малък дял към общото замърсяването на въздуха са строителните, ремонтните и битовите дейности. (http://sofia.bg/smet/Programa_OS_1.pdf)

Замърсяването на въздуха силно зависи от емисиите на примесите. Ето защо изследването на приноса на емисиите от отделни категории източници (SNAP категории) към общата картина на замърсяване е задача с голямо практическо значение, чито резултати могат да бъдат пряко използвани при формулирането на краткосрочни (текущи) решения и дългосрочни стратегии за намаляване замърсяването на въздуха.

IV.2 Емисионни сценарии и някои полета на ансамбъло осреднените приноси на отделните категории източници към приземните концентрации.

Резултатите в настоящата глава са получени въз основата на 5 емисионни сценария, всеки един за целия период от 2008 - 2014 година.

Изборът на тези сценарии е подбран спрямо разпределението на дяловете на всяка категория източници, към общата емисионна картина както в страната, така и в София. Инвентаризацията на емисиите на TNO е за 10 SNAP категории, което, позволява оценката на приноса на различни антропогенни дейности към общата картина на замърсяване на страната и по специално за разглеждания район София град.

Източниците от SNAP категория 01 (Енергетика) имат най-голям дял в сумарните, както за страната, така и за София емисии на SOx и NOx. Източниците от SNAP категория 02 (Неиндустриални изгаряния) имат относително малък дял в сумарните за страната емисии на повечето замърсители, но за София имат голям дял към сумарните за NOx. Емисиите от SNAP категория 03 (Индустриални изгаряния) имат голям дял в сумарните за страната и София емисии на CO, но също така са със втори по-големина дял в

сумарните емисии на SOx. За София източниците от SNAP категория 03 имат и най-голям дял от сумарните за града емисии на PMC. Източниците от SNAP категория 07 (Пътен транспорт) са с втори по големина дял в сумарните емисии на NOx за страната и за София и имат най-голям дял към сумарните за София на PM2.5. Най-голям дял към сумарните за София имат емисиите от SNAP категория 01 (Енергетика), поради наличието на точкови източници в областта.

Поради разпределението на емисиите от различните източници към сумарните за страната и София град бяха подбрани точно тези 5 сценария:

Сценарий 1: Емисиите от SNAP_01 (Енергетика) редуцирани с фактор 0.8

Сценарий 2: Емисиите от SNAP_02 (Неиндустриални изгаряния) редуцирани с фактор 0.8

Сценарий 3: Емисиите от SNAP_03 (Индустриални изгаряния) редуцирани с фактора 0.8

Сценарий 4: Емисиите от SNAP_07 (Пътен транспорт) редуцирани с фактора 0.8.

Сценарий 5: Емисиите от всички категории SNAP_ALL редуцирани с фактора 0.8

В глава IV.2. са представени някои осреднени по ансамбъл приноси на източници от категории SNAP_01, SNAP_02, SNAP_03, SNAP_07 и SNAP_ALL (източниците от всички категории) водещи до замърсяването на територията на град София. В глава IV.3. са представени съответните оценки, осреднените за територията на София и за отделни точки от града. В автореферата само ще бъдат описани резултатите от тези две глави.

Годишни полетата на средните относителни приноси на емисиите от SNAP_01, SNAP_02, SNAP_03, SNAP_07 и SNAP_ALL водещи до образуването на азотен диоксид (NO₂).

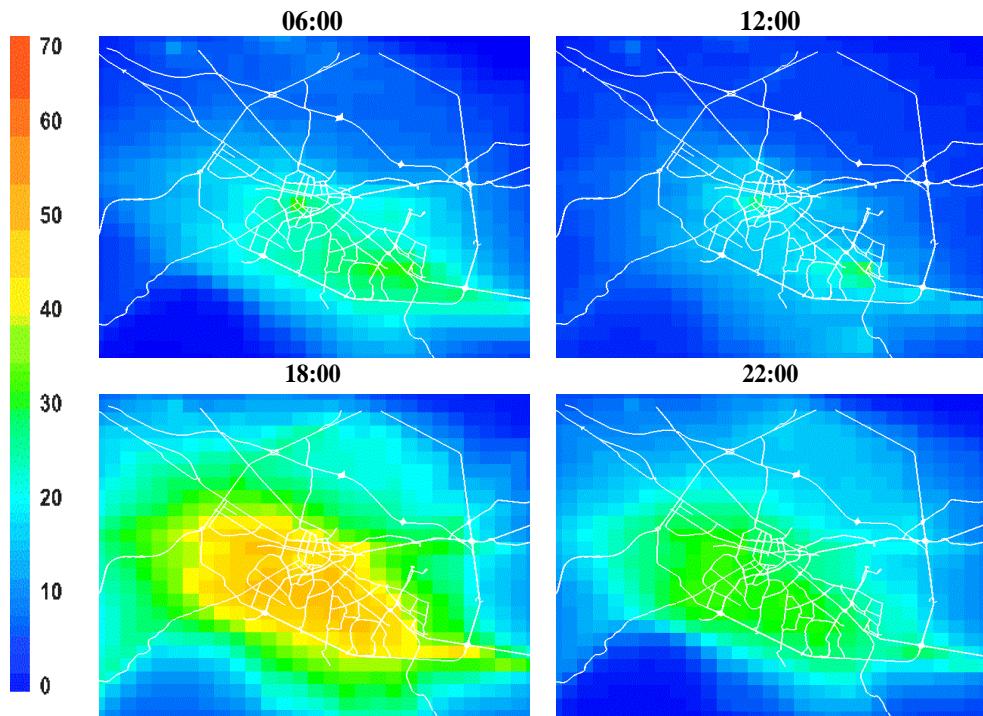
От полетата за средните годишни приноси на емисиите от SNAP_01 Енергетика за образуване на приземен азотен диоксид (NO₂), в 06:00 и 12:00 часа добре се открояват две точки, които са двата ТЕЦ-а в София - ТЕЦ Изток (кв. Дружба) и ТЕЦ София (централна част), като места с висок и силно локализиран над тях принос около 40 – 50 %. Приносът на тецовете е максимален в сутрешните часове. В 18:00 се забелязва понижение в приносите на тецовете и вече в 22:00 часа са най-ниските приноси за цялата област.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_02 Неиндустриални изгаряния за образуване на приземен азотен диоксид (NO₂), се вижда, че през цялото денонощие той е положителен, като най - голям е за района на ТЕЦ Изток около 50%. Откроява се и центъра на града с принос около 30% през целия ден. Над останалата част средният годишен принос е около 20% - 30%.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_03 Индустрислни изгаряния за образуване на приземен азотен диоксид (NO₂), се вижда, че той е изцяло положителен. Най-висок е приноса за района на двата ТЕЦ-а София и Изток, около 40% в 06:00 и 12:00 часа. В следобедните и нощните часове приноса се откроява само в Центъра и то с доста висок процент около 40 - 50%.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_07 Автомобилен транспорт за образуване на приземен азотен диоксид (NO₂) (**Фигура IV.2.1.**), се вижда, че през цялото денонощие той е положителен. В 06:00 и 12:00 часа средният принос е най-нисък около 30% за районите около двата ТЕЦ-а София и Изток. В 18:00 часа приносът е най-висок около 50%, като се открояват южните квартали и централните части на София.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от всички категории SNAP_ALL за образуване на приземен азотен диоксид (NO₂), се вижда, че той е изцяло положителен. В 06:00, 12:00 часа приносът е около 40% в района на ТЕЦ София и ТЕЦ Изток, докато в 18:00 и 22:00 часа се вижда, че почти за цялата област средният принос е максимален и е около 40%-50%. С по-нисък принос около 20% се откроява Северната дъга на околовръстния път. Като място с висок положителен принос се откроява и района на Костинброд. В 06:00 часа средният принос е минимален.



Фигура IV.2.1. Средни годишни приземни приноси [%] на SNAP_07 за NO₂.

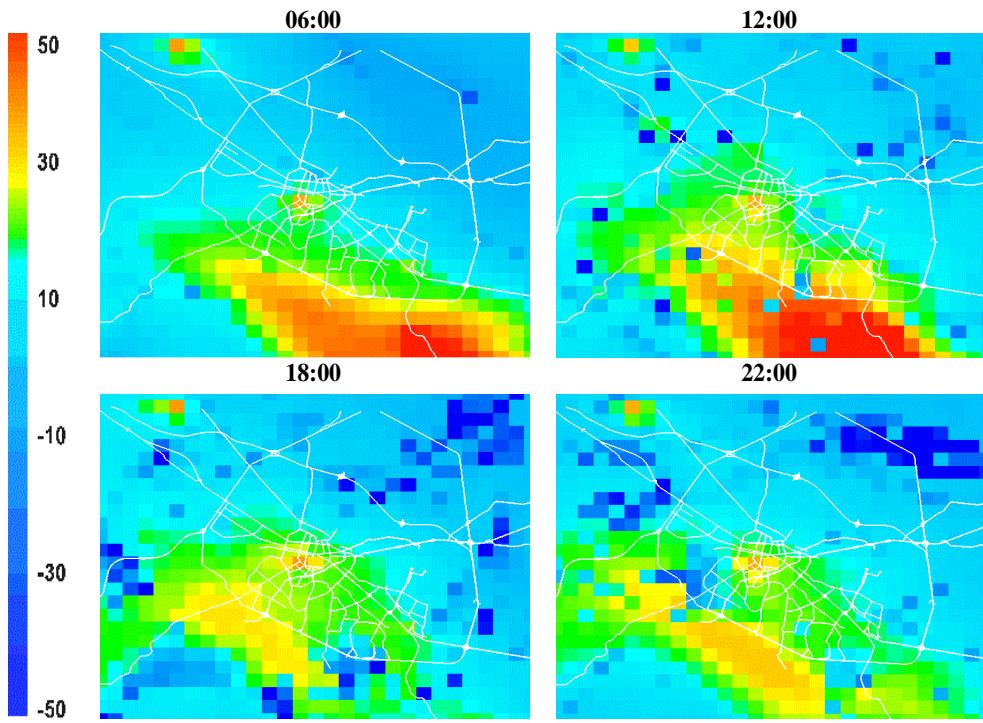
Годишният полетата на средните относителни приноси на емисиите от SNAP_01, SNAP_02, SNAP_03, SNAP_07 и SNAP_ALL водещи до образуването на озон (O_3).

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_01 Енергетика за образуване на приземен озон (O_3), се вижда, че той е строго отрицателен. В 06:00 и 12:00 часа, приносът почти над целия град включително и над планините е почти нулев, като се открояват централните части на града с отрицателен принос около -50% в 06:00 и 12:00 часа и района около ТЕЦ Изток с голям отрицателен принос около -80 - (-100)% в 12:00 часа. В следобедните и вечерните часове приноса на емисиите от този снап почти над цялата област става отрицателен. Това показва, че озонът в района на град София се дължи най-вече на пренос в областта, а собствените източници чрез еmitиранияте азотни оксиди допринасят за разграждането на озона.

На фигурите не се открива качествена и количествена разлика при приноса на емисиите от различните SNAP категории, което само потвърждава това, че озона над София град се формира на друго място извън града и неговото количество и разпределение се дължи на пренос отвън към града. При сезонното разпределение (Приложение IV) може да се проследи разлика, която през топлите сезони се откроява с отрицателни приноси клонящи към нула от всички снапове над цялата област, освен над Витоша планина, където приносите са големи и строго отрицателни.

Годишният полетата на средните относителни приноси на емисиите от SNAP_01, SNAP_02, SNAP_03, SNAP_07 и SNAP_ALL водещи до образуването на серен диоксид (SO_2).

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_01 за образуване на приземен серен диоксид (SO_2) (Фигура IV.2.2.), се вижда, че той е предимно положителен в района на Панчарево, подножието на Витоша планина, центъра на града и района на Костинброд. Максимален е приноса в 06:00 и 12:00 часа в района на Панчарево около 50%.



Фигура IV.2.2. Средни годишни приземни приноси [%] на SNAP_01 за SO₂

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_02 за образуване на приземен серен диоксид (SO₂), се вижда, че той е положителен като се открояват местата центъра на града, ТЕЦ Изток и района на Костинброд. Максимален е приноса в 06:00 и 12:00 часа на тези места около 50%.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_03 за образуване на приземен серен диоксид (SO₂), се вижда, че той е положителен като се открояват местата центъра на града и района на Костинброд. Максимален е приноса за района на Костинброд, през цялото денонощие около 50%.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_07 за образуване на приземен серен диоксид (SO₂), се вижда, че той е много малък и положителен като се открояват местата центъра на града, района на Костинброд и района на Панчарево. Над останалата част от областта принос е почти нулев.

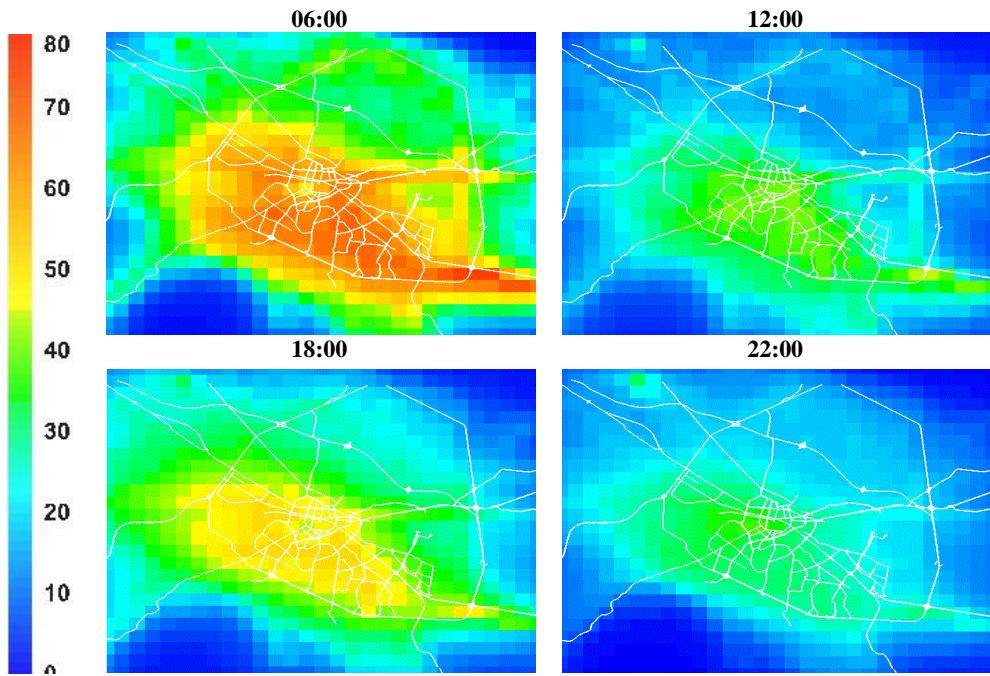
От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_ALL за образуване на приземен серен диоксид (SO₂), се вижда, че той е максимален и положителен почти над цялата област. Максимален е приноса за района на Костинброд както и над Панчарево в 06:00 и 12:00 часа около 50%. Над планините приноса е нулев.

На всички фигури се откриват и места със строго и големи отрицателни стойности, особено в следобедните и вечерните часове. Тези отрицателни приноси вероятно се дължат на локални процеси на хетерогенна химия и взаимодействието с аерозоли.

Годишни полетата на средните относителни приноси на емисиите от SNAP_01, SNAP_02, SNAP_03, SNAP_07 и SNAP_ALL водещи до образуването на финни прахови частици (FPRM).

От полетата за средния годишния принос на емисиите от SNAP_01 за образуване на финни прахови частици (FPRM), се вижда, че приносът през цялото денонощие навсякъде е положителен. Само над високите части на планините Витоша и Стара Планина той е минимален и почти нулев, а над останалата част от областта принос е около 30%. Приносът е най-висок над централните части на града, южните квартали и района на Костинброд около 40%.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от Неиндустриалните изгаряния SNAP_02 за образуване на финни прахови частици (FPRM), се вижда, че приносът през цялото денонощие навсякъде е положителен, като средният принос за града е около 30%. В 06:00 часа приноса е най-висок около 40% в централните части на града, като се откроява и района на Костинброд в северозападната част. В 18:00 средният принос намалява и в 22:00 часа вече той е минимален около 20%.



Фигура IV.2.3. Средни годишни приземни приноси [%] на SNAP_07 за FPRM.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от Промишлеността SNAP_03 за образуване на финни прахови частици (FPRM, се вижда, че приносът през цялото денонощие навсякъде е положителен. В 06:00 и 18:00 часа той е максимален за цялата област, а в 12:00 и 22:00 часа е максимален само в центъра и района на Костинброд. Средния принос за почти цялата област е около 20%.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от Автомобилния транспорт SNAP_07 за образуване на финни прахови частици (FPRM) (Фигура IV.2.3.), се вижда, че приносът през цялото денонощие навсякъде е положителен. В 06:00 и 18:00 часа средният принос е максимален и е около 50%, като в 06:00 се откроява с принос над 60%. В 12:00 и 22:00 часа приноса е по нисък в сравнение с другите часове, но въпреки това остава около 30% в централните части и началото на АМ Тракия както и основните пътни трасета в Столицата.

От полетата за средния годишния принос на емисиите от всички категории източници SNAP_ALL за образуване на финни прахови частици (FPRM), се вижда, че приносът през цялото денонощие навсякъде е положителен и максимален. Достига стойности над 60% за цялата област освен над планините Витоша и Стара планина, където той е нулев през цялото денонощие. Приносът е максимален в 06:00 и 18:00 часа със стойности около 70%, в централните части и южните квартали, като с голям принос се откроява и района на Района на Костинброд.

IV.3. Годишно и сезонни осреднени приземни приноси на отделните категории източници за отделни точки от град София.

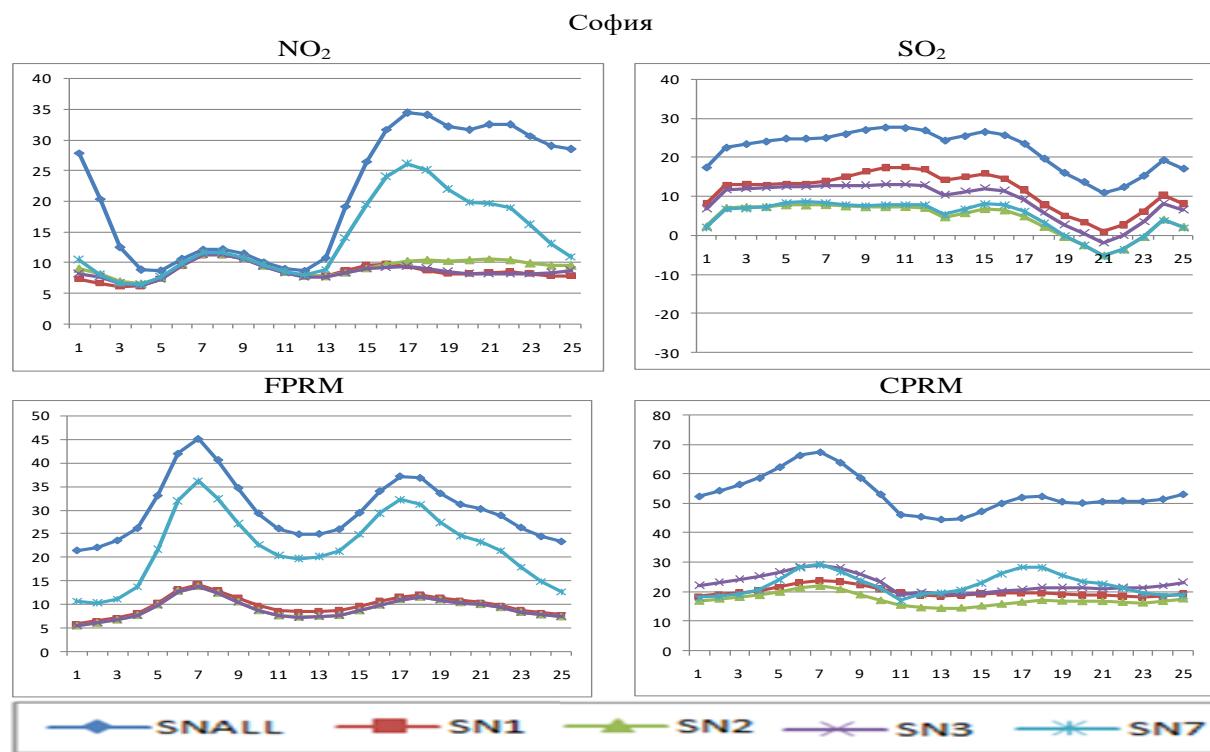
Показаните по-горе резултати за приземният относителен принос на различните източници осреднени по целия ансамбъл получени чрез компютърно симулиране, могат да бъдат използвани за да се определят, както относителните приноси на отделните източници за определен замърсител за областта, така и за избрана отделна точка от нея. Това дава ценна информация за дългосрочни или краткосрочни стратегии за намаляване на емисиите от въпросните източници на замърсяване, за да се предпази съответната област или регион от превишаване на определените Пределно Допустимите Концентрации (ПДК). Подбрани са точките така, че да има представителна от всеки от засегнатите по-горе райони, показващи най-голямо замърсяване. От централните части са показани точките Орлов мост и Руски паметник, от южните части представител е точка Зоопарк, естествено са отразени и двата ТЕЦ-а в София - "Изток и София", Панчарево и една чисто планинска точка е избрана за по-добро сравнение - Копитото. Във всички тези точки са показани осреднените приноси на емисиите от различните SNAP категории водещи до образуването на даден замърсител.

Тук ще бъдат показани само Годишно осреднени приземни приноси на отделните категории източници за град София, а за останалите точки ще бъдат накратко описани.

От **Фигура IV.3.1.** за осреднените по ансамбъла годишни и сезонни (представени в дисертацията) приноси на отделните източници, водещи до формирането на приземен NO_2 в София, през отделните сезоni приносът на различните типове източници е различен, но с почти еднакъв денонощен ход. Навсякъде в следобедните часове и през нощта водещ е приносът на емисиите от всички снапове, (SNALL) - около 40% следван от този на автомобилния транспорт (SN7) около 30%, през всички сезоni. Приносът на всички останали източници в сутрешните часове имат лек пик около 10% принос.

От фигурите за осреднените по ансамбъла годишни и сезонни представени в дисертацията приноси на отделните източници, водещи до формирането на приземен O_3 се вижда, че през отделните сезоni приносът на различните типове източници е различен, но с почти еднакъв денонощен ход и освен това той е изцяло отрицателен. В сутрешните и следобедните часове са най-големите отрицателни стойности, докато около обяд приносът на всички снапове се доближава до 0. През зимните месеци, се открояват най-големите отрицателни стойности, а през есента и лятото - най-малките. Не може да се определи кои източници, са с най-голям принос, всички имат еднакво разпределение.

От **Фигура IV.3.1.** за осреднените по ансамбъла годишни и сезонни (представени в дисертацията) приноси на отделните източници, водещи до формирането на приземен SO_2 се вижда, че той е изцяло положителен, и че през отделните сезоni приносът на различните типове източници е различен и с почти еднакъв денонощен ход. Навсякъде доминиращият принос е този на източниците от всички снапове (SNALL) около 30%, следван от този на енергетиката (SN1) около 20%. Приносът на останалите източници е под 10%. Максимални приноси на емисиите от всички снапове и на тези от енергетиката се забелязват около обедните часове.



Фигура IV.3.1: Осреднени по ансамбъл годишни приноси на отделните източници, водещи до формирането на приземените концентрации на азотен диоксид, озон, серен диоксид, финни и еди прахови частици.

От **Фигура IV.3.1.** за осреднените по ансамбъла годишни и сезонни (представени в дисертацията) приноси на отделните източници, водещи до формирането на приземни FPRM се вижда, че през отделните сезоni приносът на различните типове източници е различен, но с почти еднакъв денонощен ход. Доминиращият принос е този на източниците от всички снапове (SNALL) около 40%, следван от този на автомобилния транспорт (SN7) - около 30%. Приносът на останалите източници е около 10% през всички сезоni. Денонощното разпределение показва, че максимален принос имат снаповете в сутрешните и

следобедните часове, а минимален около обяд (ефекта на по-интензивен вертикален пренос при преобладаващо неустойчива атмосфера) и през нощта.

От **Фигура IV.3.1.** за осреднените по ансамбъла годишни и сезонни (представени в дисертацията) приноси на отделните източници, водещи до формирането на приземни CPRM се вижда, че приносите са изцяло положителни и през отделните сезони приносът на различните типове източници е различен, но с почти еднакъв денонощен ход. Навсякъде доминиращият принос е на източниците от всички снапове (SNALL) около 50%. Вторият по големина принос е на автомобилния транспорт (SN7), като в сутрешните часове, той се изравнява с приноса на емисиите от промишлеността (SN3). Най-големи стойности на приносите са в сутрешните часове през всички сезони, както и в следобедните. Най-малък принос имат източниците на Неиндустриалните изгаряния около 10%.

Осреднените по ансамбъла годишни и сезонни приноси на отделните източници, водещи до формирането на приземните концентрации на замърсителите за различни избрани точки от областта, са представени в дисертацията, както и в **Приложение IV.**

IV.4.Изводи

От полетата за средните относителни приноси на емисиите от различните SNAP категории, водещи до образуването на различни замърсители могат да се направят следните изводи:

Приносът на емисиите от (SNAP_01) Енергетиката е положителен за почти всички карти с изключение на озоновите полета, където приноса е отрицателен. Много добре се открояват двата ТЕЦ-а "София" (в центъра на града) и "Изток", в кв. "Дружба". Максималният принос на SNAP_01 към приземните концентрации на серен диоксид е в района на Панчарево особено през деня, както и в района на района на Костинброд. Големият относителен принос на източниците от енергетиката в подножието на Витоша през деня вероятно се дължи на особеностите на локалната циркулация в Софийското поле – потоци насочени към планината, което комбинирано с по-интензивното смесване през деня евентуално води до по-високи приземни концентрации на серен диоксид.

При полетата на средния принос на енергетиката към формирането на финни прахови частици, се открояват централните части и района на Костинброд.

Приносът на емисиите от Неиндустриалните изгаряния (SNAP_02) също е положителен над територията на града освен при полетата за озона, където е строго отрицателен. Тук се открояват 3 точки, като места с най-голям принос на емисиите от тази категория и това са Центъра на града, ТЕЦ "Изток" и района на Костинброд. Максимален е приноса на емисиите от Неиндустриалните изгаряния за образуването на прахови частици.

Приносът на емисиите от Индустрисалните изгаряния (SNAP_03) е положителен макар и по-малък в сравнение с другите категории, за всички замърсители без озона като се открояват местата Центъра на града и района на Костинброд с максимален принос.

Приносът на емисиите от Автомобилния транспорт (SNAP_07) е положителен и максимален за образуването на азотен диоксид (NO_2) и прахови частици (PM). Добре се описват по-големите пътни трасета в столицата като основен източник на NO_2 . Местата с най-голям положителен принос на емисиите от тази категория са предимно в южните квартали - Южната дъга на околовръстния път, изхода на Цариградско шосе към АМ Тракия и централните части характеризирани се с едни от най-натоварените пътни транспортни трасета. Там където са местата с максимален положителен принос на транспорта към образуването на азотен диоксид (NO_2), при озоновите полета ситуацията е обратна - на тези места приноса е строго отрицателен и максимален, което означава, че това са районите където озона (O_3) най-силно се разрушава.

Приносът на емисиите от всички категории към образуването на всички замърсители с изключение на озона, напълно естествено е максимален и положителен спрямо всички останали приноси на разгледаните категории. Местата, на които този принос е максимален са центъра на града, южните квартали и района на Костинброд, вероятно дължащ се на разгледаните по горе категории SNAP_01, SNAP_02, SNAP_03, SNAP_07. Районите над планините Витоша и Стара планина са местата с нулев принос на емисиите от всички снапове поради липсата на източници.

На полетата за образуване на озон и приносите на различните категории не се открива качествена и количествена разлика при приноса на емисиите, той е строго отрицателен. Това потвърждава, че озона над град София се формира на друго място извън града и неговото количество и разпределение се дължи на пренос отвън навътре към територията на града. Местата на които приноса на транспорта е максимален и положителен, то там има "изаждане" и разрушаване на озона. За повечето точки избрани от областта, доминиращ е приноса на автомобилния транспорт (SNAP_07) през деня, а през нощните часове доминиращ отрицателен принос имат Неиндустриалните изгаряния (SNAP_02).

Прави впечатление изключително големият по абсолютна стойност отрицателен принос, който се наблюдава на места на практика за всички категории източници. Този изключително голям по абсолютна стойност отрицателен принос се дължи на простиия факт, че в някои, ограничени по брой епизоди самите базови (с отчитане на всички източници) концентрации са много малки, на практика близки до нула, което естествено води до много големия по абсолютна стойност принос.

За територията на град София относителните приноси имат добре изразен денонощен и сезон ход. Сезонният ход може да бъде различен за различните замърсители и да се мени в зависимост от източника на дадената емисия. Това се проследява на графиките за осреднените приземни приноси на отделните източници за различни точки.

Както за град София (цялата област), така и за отделните разглеждани точки може да се направи обобщен извод, че за образуването на азотен диоксид (NO_2) и Прахови частици (PM) доминира Автомобилния транспорт (SNAP_07), а за серния диоксид (SO_2) - Енергетиката и Индустриталните изгаряния (SNAP_01, SNAP_03). Приносът на емисиите от всички категории (SNAP_ALL) в отделните точки, както и за цялата област София град, е по-малък от 100% (за някои замърсители е значително по-малък от 100%), което означава, че част от концентрациите се формират и от източници, които са външни за областта D5 и са резултат на пренос през границите и.

Глава V: Оценка приноса на различните процеси към формиране на замърсяването за град София.

V.1 Въведение

Атмосферното замърсяване формира в резултат на взаимодействието на различни динамични и химични процеси. Разглеждането на взаимодействието и приноса на тези процеси дава възможност за обяснение на общата картина на замърсяване в град София.

Процесите, които влияят върху формиране картина на замърсяване са: хоризонтална и вертикална дифузия, хоризонтална и вертикална адвекция, емисии, сухо отлагане, химически трансформации, аерозолни процеси, хетерогенна химия и облачни процеси, запазване/съхранение на масите.

В настоящата глава ще бъдат представени главно някои резултати от компютърните симулации, оценяващи приноса на различните динамични процеси на пренос и трансформация на замърсителите, които формират климата на замърсяването на въздуха за град София. В **V.2.** е представено кратко описание на “Integrated Proces Rate Analisys” функцията на модела СМАQ, позволяваща разглеждането на тези процеси и техния принос, в **V.3** са представени двумерни полета и графики на някои осреднени по ансамбъл приземни (първия слой в областта на интегриране) приноси на отделните процеси. В **V.4.** са изводите от направените симулации.

V.2 Функцията на модела СМАQ - “Integrated Proces Rate Analisys”.

Химичния транспортен модел СМАQ, който е използван при симулациите има специфична опция “Integrated Process Rate Analysis”, която дава възможност да се оцени ролята на всеки от отделните процеси споменати по-горе, при формиране на атмосферното замърсяване. По този начин изменението на концентрацията за даден интервал от време Δc може да се представи като сума от приноса на различните процеси:

Процеси:

HADV - Хоризонтална дифузия
ZADV - Вертикална дифузия
HDIF - Хоризонтална адвекция
VDIF - Вертикална адвекция
EMIS - Емисии
DDEP - Сухо отлагане
CLDS - Облачни процеси
CHEM - Химични процеси
AERO - Аерозолни процеси

Включването на опцията за изследването на приносите на отделните процеси, дава възможност да се определят не само приносите на отделните процеси за определен замърсител, но също така и за група от замърсители:

GNOY = NO + NO2 + NO3 + 2*N2O5 + (HONO + HNO3 + PNA) - **Азотни окиси**

ORG_N = PAN + NTR - **Органични нитрати**

HYDC = PAR + ETH + OLE + TOL + XYL + ISOP - **Хидро Карбони**

CAR_PHE = PAR + ETH + OLE + TOL + XYL + ISOP - **Карбон Феноли**

CPRM = ACORS + ASEAS + ASOIL - **Едри Прахови Частици (CPRM)**

A2_5 = SO4 + NH4 + NO3 + EC +(ORGA + ORGB) + PM2.5- **Финни Прахови Частици (FPRM)**

В тази глава се разглеждат само една група от газовите замърсители GNOY и две групи от праховите замърсители CPRM и FPRM (едри и финни прахови частици).

V.3. Осреднените приземни приноси на отделните процеси

Изследването на отделни процеси на транспорт и трансформация на замърсителите има за цел да покаже, кой или кои процеси са водещи при определяне замърсяването на въздуха. Това силно зависи не само от емисиите на даденият замърсител, релефа, подложната повърхност и метеорологията, но и от спецификата на даденият замърсител - дали той е газ или аерозол, дали, до колко и как ще му влияят химичните и аерозолните процеси при изменението на неговите концентрации.

В дисертацията са представени само годишно осреднените полета на приземните приноси на различните процеси (VDIFF, HDIFF, VADV, HADV, EMIS, DDEP, CLDS, CHEM, AERO), водещи до образуването на различните замърсители (GNOY, NO₂, O₃, SO₂, CPRM и FPRM). Сезонните полета на

въпросните приноси на процесите водещи до формирането на замърсителите за град София са представени в **Приложение V.**

В автореферата ще бъдат показани само годишно осреднените полета на приземните приноси на различните процеси, водещи до образуването на азотен диоксид (NO_2), **Фигура V.3.1.** и озон (O_3) **Фигура V.3.2.**, а приноса на процесите към останалите замърсители за областта са показани в дисертацията, а тук само ще бъдат описани накратко.

Средно годишни полетата на приземните приноси на процесите (HADV, VADV, HDIFF, VDIFF, DDEP, CLDS, CHEM, EMIS) водещи до образуването на въглероден диоксид (NO_2).

От полетата за средните приноси на хоризонталната адвекция за образуване на приземен азотен диоксид (NO_2) се вижда, че минималните стойности са по Витоша планина, в центъра на града и самите източници. Откроява се също така и над ТЕЦ "Изток" с минимални стойности. Максимални стойности се наблюдават в подножията на планините. В 18:00 часа приносът на хоризонталната адвекция е най-малък, а в 06:00 най-голям.

От полетата за средните приноси на вертикалната адвекция за образуване на приземния азотен диоксид (NO_2) се вижда, че максималните стойности са по планините, а минимални се наблюдават в подножията на планините, точно противоположно на плотовете от хоризонталната адвекция. В 18:00 часа приносът на вертикалната адвекция е най-малък, а в 12:00 най-голям.

Двойката Хоризонтална-Вертикална адвекция се изменят в един диапазон и са с противоположни знаци, което е отражение на уравнението на непрекъснатостта. И двете адвекции добре описват планинските части.

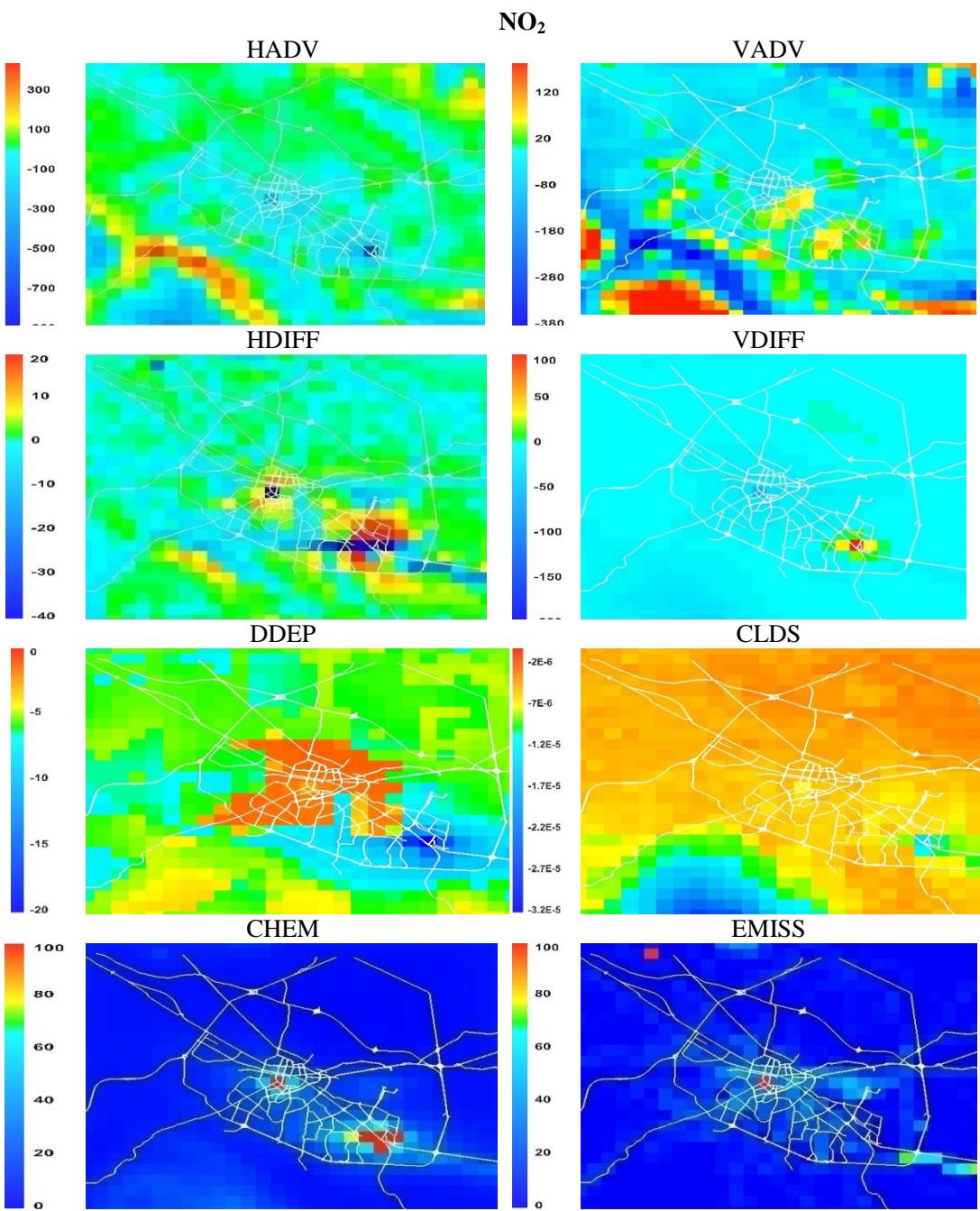
Следващата разглеждана двойка е Хоризонтална-Вертикална Дифузия **Фигура V.3.1..** От полетата за средните приноси на хоризонталната дифузия за образуване на приземния азотен диоксид (NO_2) се открояват минимални стойности в подножията на планините, центъра на града и над ТЕЦ "Изток". Завишени стойности се наблюдават по планините и около самите източници на NO_2 . В 18:00 часа приносът на хоризонталната дифузия е най-малък, а в 06:00 най-голям (големи хоризонтални градиенти на концентрацията).

Полетата за средните приноси на сухото отлагане за образуване на приземния азотен диоксид (NO_2) показват, че той, естествено, е отрицателен над цялата територия на града. Като специфичен район се откроява центъра на града, където приноса на отлагането е нулев, а мястото с най-голям отрицателен принос е ТЕЦ "Изток" в квартал "Дружба" в сутрешните часове. През нощта в 22:00 часа приносът на сухото отлагане навсякъде е нулев.

От полетата за средните приноси на облачните процеси и водната химия за образуване на приземния азотен диоксид (NO_2) се вижда, че той е изцяло отрицателен. Мястото с най-голям отрицателен принос е над Витоша планина в сутрешните и обедните часове.

От полетата за средните приноси на химичните процеси за образуване на приземния азотен диоксид (NO_2) се вижда, че приносът е положителен като местата с най-високи стойности са централните части и ТЕЦ "Изток" в сутрешните часове. В следобедните и вечерните часове средният принос намалява, като само центъра на града се откроява с висок принос на химичните процеси.

Полетата за средния принос на емисиите за образуването на приземния азотен диоксид (NO_2) са като тези на химичните процеси - положителен за град София, като местата с най-голям положителен принос са центъра на града, района на АМ "Тракия" и района на Костиинброд в западната част на София. Максимален положителен принос се наблюдава в 06:00 и 12:00 часа.



Фигура V.3.1. Средно годишен приземен принос на процесите (HADV, VADV, HDIFF, VDIFF, DDEP, CLDS, CHEM, EMISS) за образуването на NO₂ [($\mu\text{g}/\text{m}^3$)/h] за 06:00 GMT

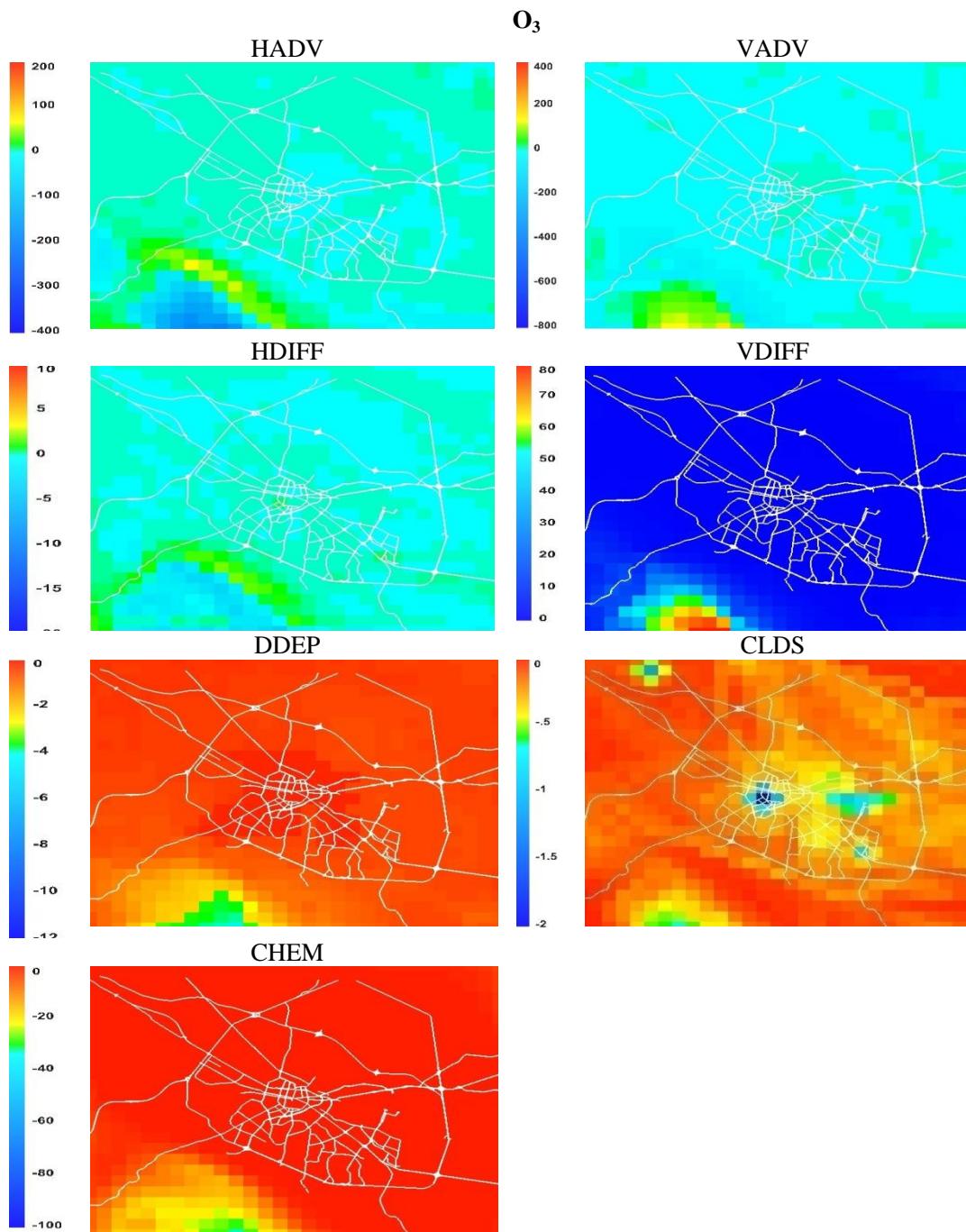
Средно годишни полетата на приземните приноси на процесите (HADV, VADV, HDIFF, VDIFF, DDEP, CLDS, CHEM) водещи до образуването на озон (O_3).

Средно годишните приземни приноси на Хоризонталната - Вертикалната адвекция **Фигура V.3.2.** водещи до образуването на озон са в противофаза. Максималните и положителни стойности за приноса на хоризонталната адвекция се наблюдават в подножията на планините и АМ "Тракия", където пък стойностите за приноса на вертикалната адвекция в тези райони са отрицателни. Минималните отрицателни стойности за приноса на хоризонталната адвекция са по планините, като най-голям отрицателен принос се наблюдава в 22:00 часа, а полетата на вертикалната адвекция по планините приноса е максимален и положителен.

От полетата за средните приноси на хоризонталната дифузия за образуване на приземния озон (O_3) се вижда, че минималните отрицателни стойности са по билата на планините. Завишени стойности се наблюдават в подножието на Витоша планина. Като цяло над по-голямата част града приноса е много

малък. В 18:00 и 22:00 часа приносът на хоризонталната дифузия е максимален и положителен в центъра на града.

Полетата за средните приноси на вертикалната дифузия обаче имат съществена разлика с приносите на вертикалната дифузия при образуването на азотен диоксид - на първо място той е изцяло положителен и на второ място там където приноса е отрицателен при образуването на NO_2 , то при озона е положителен. С други думи стойностите са в противофаза. Това е нормално при положение, че основните източници на NO_2 са приземните, а приземния озон е резултат в голяма степен на вертикален пренос от по-високи нива. Най-високите стойности се наблюдават над Витоша планина и приносът е най-голям в 06:00 часа и най-малък в 22:00 часа почти нулев.



Фигура V.3.2. Средно годишен приземен принос на процесите (HADV, VADV, HDIFF, VDIFF, DDEP, CLDS, CHEM) за образуването на O_3 [$\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$] за 06:00 GMT

От полетата за средните приноси на сухото отлагане за образуване на приземния озон (O_3) се вижда, че той е отрицателен, като сухото отлагане в центъра на града е почти nulla. Местата с най-голям отрицателен

принос са над планините. В 12:00 часа отрицателният принос на сухото отлагане е най-голям, а в 06:00 е почти нулев навсякъде освен над Витоша планина.

Полетата за средните приноси на облачните процеси и водната химия за образуване на приземния озон (O_3) показват, че местата с по-голям отрицателен принос са центъра на София и района на Костинброд. Отрицателния принос е най-голям в 22:00 часа, където се откроява и Витоша планина.

От полетата за средните приноси на химичните процеси за образуване на приземния озон (O_3) се вижда, че той е отрицателен. Местата с най-голям отрицателен принос са ТЕЦ "Изток" и центъра на града в 18:00 и 22:00 часа. В сутрешните часове приноса над целия град е нулев с изключение на Витоша планина.

Средно годишни полетата на приземните приноси на процесите (HADV, VADV, HDIFF, VDIFF, DDEP, CLDS, CHEM, EMIS, AERO) водещи до образуването на азотни окиси (GNOY).

Фигурите на средно годишните приноси на Хоризонталната и Вертикалната адвекция представени в дисертацията водещи до образуването на азотните окиси и тук са в един диапазон и също са с противоположни знаци. Прави впечатление също така, че те са около 2 пъти по големи от тези на азотния диоксид. Максималните стойности на приноса на хоризонталната адвекция (и съответно минимални при вертикалната) са в подножието на планините и околовръстната мрежа на града. Максимален отрицателен принос се откроява в центъра на града и около ТЕЦ "Изток". Обратното важи за полетата на приноса на вертикалната адвекция.

От полетата за средните приноси на хоризонталната дифузия за образуване на приземни азотни окиси (GNOY) се вижда, че минималните стойности са над самите източници. Завишени стойности се наблюдават в подножията на планините и покрай източниците.

Полетата за средните приноси на вертикалната дифузия показват, че приносът почти навсякъде е отрицателен, като най-ниските стойности се наблюдават в централните части на града. Отрицателен принос се откроява и над Витоша планина в сутрешните часове. Приносът на вертикалната дифузия е положителен и дори максимален само над ТЕЦ "Изток".

От полетата за средните приноси на сухото отлагане за образуване на приземни азотни окиси (GNOY) се вижда, че в централните части на града сухото отлагане е почти нула. Местата с най-голям отрицателен принос са над планините и около АМ "Тракия". В 18:00 и 22:00 часа приноса на сухото отлагане почти навсякъде намалява.

От полетата за средните приноси на облачните процеси за образуване на приземни азотни окиси (GNOY) се вижда, че местата с най-голям отрицателен принос са над планините. В 06:00 часа приноса на облачните процеси е почти нулев, а максимален отрицателен той е в 22:00 часа.

От полетата за средните приноси на химичните процеси за образуване на приземни азотни окиси (GNOY) се вижда, че приносът навсякъде е отрицателен като мястото с най-ниски е централната част. В 12:00 стойностите стават положителни и тренда се обръща, но все пак си остават пренебрежимо малки и близки до нула.

Полетата на средният принос на емисиите показват, че той е положителен. Местата с най-голям принос в 06:00 и 12:00 са части на централна София. В 18:00 и 22:00 приноса намалява.

Полетата за средния принос на аерозолните процеси показват, че той е изцяло положителен. Максимален е приноса в обедните часове около $40 (\mu\text{g}/\text{m}^3)/\text{h}$ предимно в центъра на града.

Средно годишни полетата на приземните приноси на процесите (HADV, VADV, HDIFF, VDIFF, DDEP, CLDS, CHEM, EMIS) водещи до образуването на серен диоксид (SO_2).

От полетата за средните приноси на хоризонталната адвекция за образуване на приземния серен диоксид (SO_2), представени в дисертацията се вижда, че минималните стойности са по планините, и самите източници на SO_2 . Тъй като хоризонталната адвекция е пропорционална на вятъра и концентрацията, а основните източници на SO_2 са високи (съответно концентрациите непосредствено под тях са сравнително ниски), малкият принос на хоризонталната дифузия непосредствено под източниците е лесно обясним.

Максималните стойности се наблюдават в подножията на планините. Приносът на хоризонталната адвекция в 22:00 най-голям. Откроява се висок отрицателен принос в района на Панчарево. При полетата на вертикалната адвекция за образуване на приземния серен диоксид (SO_2) е обратно на тези от хоризонталната - максималните стойности са над самите източници, и по Витоша планина. Минимални стойности се наблюдават в подножията на планините.

Полетата за средните приноси на хоризонталната дифузия за образуване на приземния серен диоксид (SO_2) показват, че минималните стойности са над ТЕЦ "Изток" и в центъра на града, както и в района на

Панчарево. Завишени стойности се наблюдават покрай горе споменатите райони. Над по-голямата част от града приноса е много малък и дори нулев. Полетата за средните приноси на вертикалната дифузия показват, че приносът почти навсякъде е нулев, като места с отрицателен принос се открояват центъра на града и района на Костинброд, а положителен принос има в района на Панчарево. Приносът е максимален в 12:00 часа.

От полетата за средните приноси на сухото отлагане за образуване на приземния серен диоксид (SO_2) се вижда, че над целия град той е отрицателен. Местата с най-голям отрицателен принос са по планините и в района на Панчарево (там където са и най-големите приземни концентрации на SO_2).

От полетата за средните приноси на облачните процеси за образуване на приземния серен диоксид (SO_2) се вижда, че местата с най-голям отрицателен принос са центъра на града и района на Костинброд в 06:00 часа. През останалата част на деновонощието се наблюдава отрицателен принос по Витоша планина. На другите места приносът е много малък и почти клонящ към нула.

Приноса на химичните процеси за образуване на приземния серен диоксид показват, че над целия град той е много малък и отрицателен. Местата с най-голям отрицателен принос са в 06:00 и 12:00 са в центъра на града и района на Панчарево, а над останалата част е почти нулев.

Полетата на средния принос на емисиите, показват, че той е изцяло положителен, като открояващите се места с най-голям положителен принос в 06:00 и 12:00 са центъра и района на Костинброд. Навсякъде другаде той е почти нулев.

Средно годишни полетата на приземните приноси на процесите (HADV, VADV, HDIFF, VDIFF, CLDS, DDEP, CHEM, EMIS, AERO) водещи до образуването на финни и едри прахови частици (FPRM / CPRM).

От полетата за средните приноси на хоризонталната адвекция за образуване на приземни фини прахови частици (FPRM) се вижда, че минималните отрицателни стойности са по планините, центъра на града и над района на Костинброд. Максималните стойности се наблюдават в подножията на планините. В 22:00 часа приносът на хоризонталната адвекция е максимален. По планините където приноса на хоризонталната адвекция е отрицателен, то приноса на вертикалната адвекция е максимален и положителен - двете адвекции са в противофаза.

От полетата за средните приноси на хоризонталната дифузия за образуване на приземни фини прахови частици (FPRM) се вижда, че отрицателните стойности са в централните части и района на Костинброд, в районите около тези места и подножията на планините приноса е максимален и положителен.

От полетата за средните приноси на вертикалната дифузия се вижда, че приносът почти над цялата страна е нулев, като най-ниски стойности са над централните части и района на Костинброд. Приносът на вертикалната дифузия е положителен и дори максимален в 12:00 часа над по-голямата част от града, планините и около Панчарево.

От полетата за средните приноси на сухото отлагане за образуване на приземни фини прахови частици (FPRM) се вижда, че почти навсякъде приноса е нулев. Местата с най-голям отрицателен принос са над планините. Най-голям отрицателен принос сухото отлагане има в 12:00 часа.

От полетата за средните приноси на облачните процеси се вижда, че преобладава нулев принос. Като приносът е най-силно отрицателен над планините и е положителен в 06:00 часа само над центъра и района на Костинброд.

От полетата за средният принос на емисиите за образуване на приземни фини прахови частици (FPRM) се вижда, че е положителен но почти нулев. Местата с най-голям положителен принос в 06:00 и 12:00 са центъра на града, района на Костинброд и АМ Тракия. Над останалата част от града приносът е почти нулев.

От полетата за средните приноси на аерозолните процеси се вижда, че местата с най-голям положителен принос са центъра, района на Костинброд и района на Панчарево в 12:00 часа. В 12:00 часа приноса на аерозолните процеси намалява дори става отрицателен над целия град освен гореспоменатите райони.

От полетата за средните приноси на хоризонталната адвекция за образуване на приземни едри прахови частици (CPRM) се вижда, че приноса е максимален отрицателен в центъра на града и над района на Костинброд, а около тези две места приноса е максимален и положителен. Над планините приноса е малък и отрицателен, а в подножията и останалата част от града е положителен.

Полетата на вертикалната адвекция също показват че приноса е максимален отрицателен в центъра на града, над района на Костинброд в 06:00 и 22:00 часа. Над планините приноса е положителен.

Полетата за средните приноси на хоризонталната дифузия за образуване на приземни еди прахови частици (CPRM) показват, че приноса е максимален отрицателен в центъра на града и над района на Костинброд, а в областите около тези 2 източника приноса е максимален и положителен.

Средните приноси на вертикална дифузия показват, че приноса е максимален отрицателен в центъра на града и над района на Костинброд. Над планините приноса е положителен, като в 12:00 часа той е максимален и положителен над целия град освен гореспоменатите 2 района.

От полетата за средните приноси на облачните процеси и водната химия, както и на сухото отлагане за образуване на приземни еди прахови частици (CPRM) се вижда, че приноса е нулев навсякъде през цялото денонощие с изключение на централните части и района на Костинброд, където приноса е отрицателен.

Полетата за средния принос на емисиите показват, че той е почти нулев. Местата с най-голям положителен принос са центъра и района на Костинброд.

Средният принос на аерозолните процеси за образуване на приземни еди прахови частици (CPRM) е много малък почти нулев. Местата, които се открояват с максимален принос са планините в 18:00 и 22:00 часа. В 06:00 часа приноса е минимален.

V.4. Годишно и сезонни осреднени приземни приноси на отделните процеси водещи до образуването на различни замърсители за територията на град София и за различни точки от град София.

Показаните резултати в глава V.3. на полетата на приземните приноси на различните процеси осреднени по целия ансамбъл, могат да бъдат използвани за да се определят и относителните приноси на отделните източници за определен замърсител и за избрана отделна точка от областта - град София. Такава ценна информация може да бъде използвана при разглеждане по детайлно замърсяването в дадена точка, на определен замърсител или семейство от замърсители.

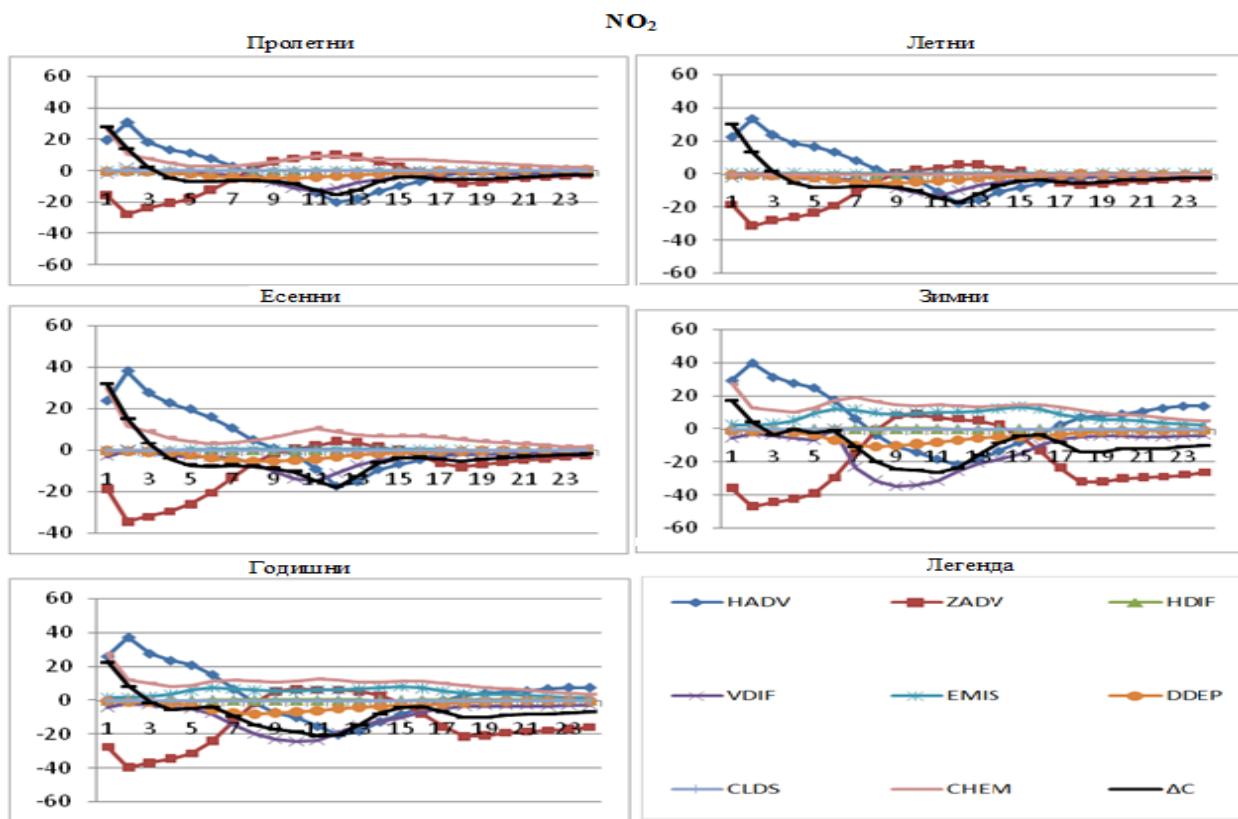
В автореферата ще бъдат показани само графики на годишно и сезонни осреднени приземни приноси на отделните процеси водещи до образуването на азотен диоксид и озон (NO_2 , O_3) за областта. Графиките на останалите разгледани 6 точки от областта град София - Копитото, НИГГ-БАН, Орлов мост, Руски паметник, ТЕЦ Изток и ТЕЦ София, и самата цяла област София са представени в дисертацията.

Годишно и сезонни осреднени приземни приноси на отделните процеси водещи до образуването на различни замърсители за територията на град София.

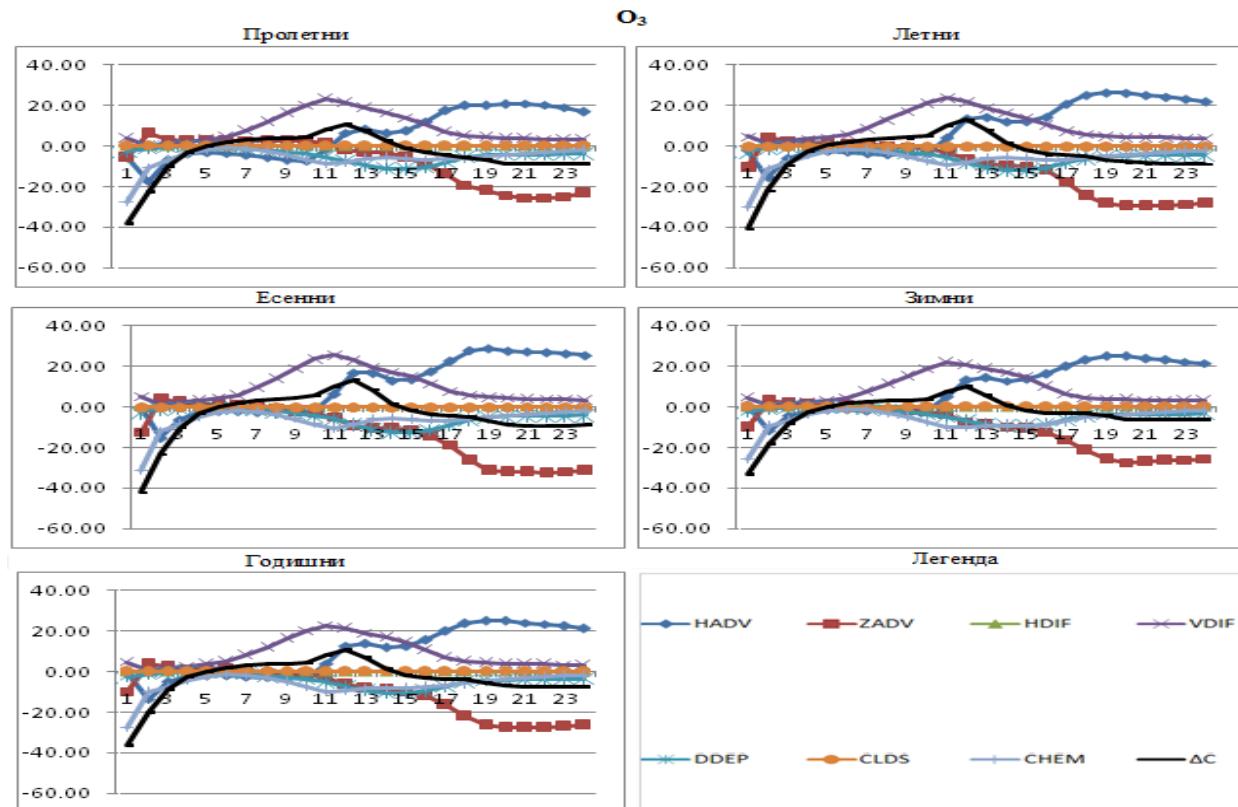
Фигура V.4.1. и **Фигура V.4.2.** показват годишно и сезонно осреднените приноси на различните процесите (HADV, ZADV, HDIF, VDIF, EMIS, DDEP, CLDS, CHEM, AERO), водещи до образуването на замърсителите NO_2 и O_3 , а за SO_2 , GNOY, CPRM, FPRM ще бъдат накратко описани, осреднени за цялата област - град София. Сумарното изменение на процесите (ΔC) е изобразено с черен цвят на всички графики и се вижда, че то е както с положителен, така и с отрицателен знак и има добре изразен денонощен ход. Стойностите на (ΔC) са различни през различните сезони и се определя от броя на процесите, които също са с различен знак. За образуването на различните замърсители доминират различни приноси с различни стойности и именно това е проследено със следващите графики - кой принос на даден процес е доминиращ, по кое време на денонощието и с какъв знак.

Фигура V.4.1 показва годишно и сезонно осреднените приноси на процесите, водещи до образуването на азотен диоксид (NO_2) осреднени за цялата област - град София. Сумарното изменение на процесите (ΔC) е предимно с отрицателен знак. За образуването на NO_2 основен принос имат химичните процеси, които са изцяло с положителен знак. Хоризонталната адекция е с положителен принос в сутрешните и следобедните часове, а около обяд става с отрицателен, с противоположна на нея фаза е Вертикалната адекция. Сухото отлагане и Вертикалната дифузия имат отрицателен принос, макар и с по-малки стойности. През зимата се откроява и положителния принос на Емисиите през цялото денонощие. Приносът на останалите процеси е почти нулев.

Фигура V.4.2 показва годишно и сезонно осреднените приноси на процесите, водещи до образуването на озон (O_3) осреднени за цялата област - град София. Сумарното изменение на процесите (ΔC) е както с положителен така и с отрицателен знак. За образуването на O_3 основен принос има Вертикалната дифузия, която е изцяло положителна през всички сезони, с максимум около обяд. Следващия доминиращ процес с положителен знак е Хоризонталната адекция в следобедните и ношните часове, а по същото време с противофаза на нея е вертикалната адекция. Приноса на Химичните процеси и сухото отлагане са отрицателни около обяд и са в противофаза с вертикалната дифузия. Останалите процеси имат почти нулев принос.



Фигура V.4.1. Приземни приноси на процесите водещи до образуването на азотен диоксид (NO_2) в [$\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$] за град София.



Фигура V.4.2. Приземни приноси на процесите водещи до образуването на озон (O_3) в $[(\mu\text{g}/\text{m}^3)/\text{h}]$ за град София.

От годишно и сезонно осреднените приноси на процесите, водещи до образуването на серен диоксид (SO_2) осреднени за цялата област - град София, представени в дисертацията, се вижда че сумарното изменение на процесите (ΔC) е с отрицателен знак. За образуването на SO_2 основен положителен принос имат Вертикалната дифузия и адвекция, през всички сезони, с максимум около обяд (пренос на SO_2 от основно високите източници), по същото време с отрицателен принос са Хоризонталната адвекция и сухото отлагане. Следващия доминиращ процес с положителен знак е на Химичните процеси през цялото денонощие, макар и с по-малки стойности. През зимата стойностите на приносите на процесите са в различна скала, тъй като по това време на годината процесите са по-активни. Зимните стойности оказват голямо влияние и при годишното осреднените. Останалите процеси имат почти нулев принос.

От годишно и сезонно осреднените приноси на процесите, водещи до образуването на азотни окиси (GNOY) осреднени за цялата област - град София, представени в дисертацията, се вижда че сумарното изменение на процесите (ΔC) е както с положителен, така и с отрицателен знак. За образуването на GNOY основен принос имат Хоризонталната и Вертикалната адвекция, както и Вертикалната дифузия. Хоризонталната адвекция има положителен принос в сутрешните и следобедните часове и отрицателен около обяд. В абсолютна противофаза е приносът на Вертикалната адвекция. Вертикалната дифузия има изцяло отрицателен принос. През всички сезони приносът на емисиите е положителен, макар и с малки стойности, освен през зимата, където става един от доминантните приноси със стойности по-големи дори от вертикалната адвекция. Останалите процеси имат почти нулев принос.

От показва годишно и сезонно осреднените приноси на процесите, водещи до образуването на едрите прахови частици (CPRM) осреднени за цялата област, представени в дисертацията се вижда че сумарното изменение на процесите (ΔC) е както с положителен, така и с отрицателен знак. За образуването на CPRM основен положителен принос имат химичните процеси, чиито стойности са най-големи от всички други, с максимум през зимните месеци. Вертикалната дифузия и Сухото отлагане имат изцяло отрицателен принос. Вертикалната адвекция в обедните часове има малък положителен принос, а в следобедните и сутрешните, той е отрицателен. Останалите процеси имат почти нулев принос.

От годишно и сезонно осреднените приноси на процесите, водещи до образуването на финните прахови частици (FPRM) осреднени за цялата област, представени в дисертацията, се вижда че сумарното изменение на процесите (ΔC) е с отрицателен. За образуването на FPRM основен положителен принос имат Вертикалната дифузия през целия ден и Вертикалната адвекция около обяд. Приносът на Вертикалната адвекция в сутрешните и следобедните часове е отрицателен. Хоризонталната адвекция е в противофаза на Вертикалната. Сухото отлагане е с отрицателен принос с максимум около обяд. Аерозолните процеси през всички сезони с изключение на зимата са с отрицателен принос. През зимата процесите са по-активни в сравнение с другите сезони и също така се откроява този сезон със голям положителен принос на Емисиите и намаляващ до отрицателен принос на Вертикалната дифузия. Останалите процеси имат почти нулев принос.

V.5. Изводи

От двумерните карти за приземните приноси на процесите водещи до образуването на замърсителите, могат да се направят следните изводи:

Приносите на двойката Хоризонтална-Вертикална адвекция се изменят в един диапазон и са с противоположни знаци - противофаза, което е отражение на уравнението на непрекъснатостта. И двете адвекции добре описват планинските части и релефа на града. Приносът на Хоризонталната адвекция (HADV) е отрицателен за всички замърсители, над планините и в центъра на града и положителен принос в подножията, като при картите за азотните окиси (GNOY) е открояват и районите на двата ТЕЦ-а "София" и "Изток" с отрицателен принос. Вертикалната адвекция (VADV) е в противофаза на Хоризонталната и тя има положителен принос по планините и отрицателен в подножията.

Приносът на Хоризонталната дифузия (HDIF) е отрицателен над самите източници - ТЕЦ "София", ТЕЦ "Изток", района на Костинброд, а около тези източници приноса е положителен.

Вертикалната дифузия (VDIF) има положителен принос над високите източници (ТЕЦ-те) и над Витоша планина при картите за озона O_3 , където са и максималните стойности. Приносът на Вертикалната дифузия е отрицателен за праховите частици (FPRM / CPRM) в центъра на града и района на Костинброд - ниски източници.

Приносът на сухото отлагане (DDEP), естествено, е отрицателен за всички замърсители, като най-голям е над ТЕЦ "Изток" и Витоша планина, а в централните части е почти нулев.

Приносът на облачните процеси (CLDS) също е отрицателен и най-голям над ТЕЦ "Изток" и Витоша планина за всички замърсители с изключение на полетата за праховите части (FPRM), където приноса е положителен и максимален в централните части и района на Костинброд.

Приносът на химичните процеси (CHEM) е отрицателен за почти всички замърсители с максимални стойности над ТЕЦ-те и Витоша планина, с изключение на полетата за азотния диоксид (NO_2), където приноса е положителен и максимален над ТЕЦ-те. Това вероятно се дължи на окисляването на NO и превръщането му в NO_2 . На картите за серния диоксид (SO_2), се откроява отрицателен принос и в района на Панчарево, но той е много малък и почти нулев.

Приносът на емисиите (EMIS) е положителен за всички замърсители, като той е най-голяма в Центъра на града, района на Костинброд и началото на АМ Тракия.

Приносът на аерозолните процеси е положителен и най-голям за всички замърсители в централните части и района на Костинброд.

Графиките показващи приносите на процесите, водещи до промяна концентрациите на замърсителите за София и отделни избрани точки от града в **глава V.4.**, водят до следните изводи:

За цялата област София град, както и за всяка една от избраните точки, сумарното изменение на процесите (ΔC), водещо до изменение на дадена концентрация има добре изразен денонощен ход и знак както положителен, така и отрицателен. Сумарното изменение на процесите е различно и за всеки замърсител и през различните сезони. Изменението на ΔC се дължи на малък брой процеси с противоположни фази и знаци, затова и неговия краен знак е както положителен, така и отрицателен.

Доминиращите приноси за всички замърсители през повечето сезони са тези на Хоризонталната и Вертикалната адвекция (HADV/ZADV) следвани от тези на Вертикалната дифузия (VDIF) и сухото отлагане (DDEP). Приносите на HADV и ZADV са винаги в противофаза и сумарното им изменение е нула. В повечето случаи и приносите на VDIF и DDEP също са в абсолютна противофаза.

За цялата област София и точките Орлов мост и Руски паметник приносът на емисиите (EMIS) през зимата става един от доминиращите приноси при образуването а азотен диоксид (NO_2) и азотните окиси (GNOY), т.е. тези райони на града сами се замърсяват с азотни окиси. Останалите процеси имат незначителен и минимален принос към промяна на концентрациите на замърсителите, спрямо доминиращите изброени по-горе приноси.

Вертикалната дифузия (VDIF) има голям положителен принос към приземния озон, което вероятно показва пренос на озон от по-високите слоеве и вероятно е следствие на пренос от външни за областта източници.

Като цяло може да се твърди, че приносите на различните процеси имат най-различно поведение и си взаимодействват по много сложен начин.

Заключение

Настоящият дисертационен труд беше осъществен с помощта на численото моделиране, като беше създаден ансамбъл от компютърни симулации достатъчно изчерпателно, надеждно и детайлно представящ състава на атмосферната и процесите на пренос и трансформации в градска среда. Полученият ансамбъл може да се използва за оценка на замърсяването на въздуха в локални машаби.

Като средство за моделиране е използвана системата от модели US EPA Models-3, които са световно признати и с доказани симулационни качества. Използвани са надеждни бази данни: инвентаризация на емисиите и емисионните времеви профили (разработени от TNO), крупномашабни метеорологични полета (US NCEP "Global Analysis Data"). Симулационният период е 7 годишен (2008-2014г.) и е достатъчно голям за да отрази и обхване целият набор типични и екстремни ситуации с тяхната характерна повторяемост и пространствено-времеви особености. Два от моделите в системата (WRF и CMAQ) притежават опция "Нестинг" или Телескопизация, която е приложена в настоящото изследване. По този начин, всички компютърни симулации, са проведени за целия период от време, като задачата е решавана последователно в няколко вместени една в друга области. Подбранныте области са 5: D1 (Европа) - 81x81 км, D2 (Балкански п-ов) - 27x27 км, D3 (България) - 9x9 км, D4 (София област) - 3x3 км и D5 (София град) - 1x1 км, като крайната цел за висока разрешаваща способност от 1км за градския район София град е постигната.

От компютърните симулации са получени осреднени по ансамбъл приземните концентрации на концентрациите на някои замърсители, изчислен е Индексът за качеството на атмосферния въздух (AQI), разгледани и съпоставени са 5 емисионни сценария, като е изследван приносът на емисиите от отделни категории източници (SNAP категории) и на различните процеси към формирането на общата картина на замърсяване в град София.

Анализът на полученият ансамбъл разкри някои основни факти за климата на замърсяване в Столицата:

1.) Сезонна и деновонощна повторяемост на осреднените по ансамбъл приземни концентрации и статистическите характеристики на замърсителите, както за града, така и за отделни точки от него, показват че:

- Районите по територията на град София, открояващи се с високи концентрации на всички замърсители са Южните части на града, Централните части, ТЕЦ "Изток" и района на Костинброд.

- Средно годишна норма на азотен диоксид (NO_2) се превишава в районите на ТЕЦ "Изток" и ТЕЦ "София". Големи стойности на концентрациите на NO_2 и праховите частици (PM) се наблюдават и в Централните части и Южните квартали. Района на Костинброд се откроява с високи концентрации на серен диоксид (SO_2) и праховите частици (FM). Озоновите концентрации не превишават определените ПДК, като по-големите концентрации се наблюдават над планините.

- Статистически характеристики на замърсителите показват, че средните по ансамбъл концентрации на NO_2 , SO_2 и FPRM/CPRM. са асиметрично разположени в различните отрязыци от броя случаи както през деновонощието, така и през различните сезони. Средните концентрации на тези замърсители попадат в 80% интервал от случаи, но в много случаи линията на средните концентрации попада дори над линията 90%, което показва, че в останалите 10% от случаите концентрациите са изключително високи. Средните концентрации на O_3 се разпределят в интервала съдържащ 50% случаи и са симетрично разположени по отношение на различните отрязыци от броя случаи през деновонощието и през различните сезони.

- Прави впечатление много високите максимални стойности на концентрациите за повечето замърсители с изключение на озона. Трябва да се има предвид, че тези стойности се получават за всяка отделна точка и част от деновонощието в различни дни и както се вижда от графиките 90% от случаите, концентрациите са много по-малки. Анализът на конкретните метеорологични условия при които тези екстремни концентрации се получават, ще бъде обект на по нататъшни изследвания.

- Средните по ансамбъл концентрации, са получени и с отчитане на екстремно високите концентрации. Една друга възможна характеристика на ансамбъла са най-вероятните концентрации, които както се вижда и от графиките ще бъдат по-ниски от средните. Определянето на най-вероятните концентрации също ще бъде обект на по нататъшна обработка на ансамбъла.

2.) Анализа на резултатите за Индекса на замърсяване (AQI) в град София, отразяващ влиянието на качеството на атмосферния въздух върху качеството на живот и здравния риск в региона показват, че:

- Местата по територията на града със занижен статус на качеството на въздуха, са същите, както при полетата на концентрациите (Центрър, ТЕЦ "Изток", района на Костинброд). Това е напълно естествено имайки предвид, че AQI се изчислява на база концентрация на даден замърсител.

- Денонощния ход и сезонното разпределение на средните повтаряемости на различните индекси показва, че е откряват AQI1, AQI2, AQI3, AQI4 (категории "Ниско" и "Средно"), като такива с най-голяма повтаряемост за всички точки и всички сезони, но е притеснително това, че в централните части на града, повтаряемостта на AQI10 (категория "Много Високо") е висока - около 40%.

3.) Съпоставянето на резултатите от петте емисионни сценария:

Сценарий 1: Емисиите от SNAP_01 (Енергетика)

Сценарий 2: Емисиите от SNAP_02 (Неиндустриални изгаряния)

Сценарий 3: Емисиите от SNAP_03 (Индустриални изгаряния)

Сценарий 4: Емисиите от SNAP_07 (Пътен транспорт)

Сценарий 5: Емисиите от всички категории SNAP_ALL

показва, че:

- Приносът на емисиите от избраните SNAP категории към образуването на замърсителите NO₂, SO₂ и PM е положителен, като максимален, той се открява във вече гореспоменатите райони.

- В полетата показващи образуването на озон и приносите на различните категории не се открива качествена и количествена разлика при приноса на емисиите, той е строго отрицателен. Това показва, че озона над град София се формира на друго място извън града и той се дължи на пренос отвън навътре към територията на града.

- Както за цялата област (град София), така и за отделните разгледани точки може да се обобщи, че за образуването на азотен диоксид (NO₂) и Прахови частици (PM) доминира приноса на Автомобилния транспорт (SNAP_07), а за серния диоксид (SO₂) - Енергетиката и Индустрислните изгаряния (SNAP_01, SNAP_03). Приносът на емисиите от всички категории (SNAP_ALL) в отделните точки, както и за цялата област София град, е по-малък от 100%, което означава, че част от концентрациите се формират и от източници, които са външни за областта в резултат на пренос през границите и.

4.) Използваната опция на модела CMAQ - "Integrated Process Rate Analysis", даде възможност да се определи ролята на всеки от отделните процеси, при формиране на атмосферното замърсяване в града.

- Приносите на различните процеси имат най-различно поведение и си взаимодействват по много сложен начин.

- Доминиращите приноси за всички замърсители са тези на Хоризонталната и Вертикалната адвекция (HADV/ZADV) следвани от тези на Вертикалната дифузия (VDIF) и сухото отлагане (DDEP). За цялата област София и точките В Центъра приносът на емисиите (EMIS) през зимата става един от доминиращите приноси при образуването а азотен диоксид (NO₂) и азотните окиси (GNOY), т.е. тези райони на града сами се замърсяват с азотни окиси. Останалите процеси имат незначителен и минимален принос към промяна на концентрациите на замърсителите, спрямо доминиращите приноси.

- Вертикалната дифузия (VDIF) има голям положителен принос към приземния озон, което вероятно показва пренос на озон от по-високите слоеве и вероятно е следствие на пренос от външни за областта източници.

- За цялата област София град, и за всяка една от избраните точки, сумарното изменение на процесите (ΔC), водещо до изменение на дадена концентрация има добре изразен денонощен ход и знак, както положителен, така и отрицателен. Сумарното изменение на процесите е различно и за всеки замърсител и през различните сезони. Изменението на ΔC се дължи на малък брой процеси с противоположни фази и знаци, затова и неговия краен знак е както положителен, така и отрицателен.

Литература

- Atanassov E., T. Gurov, A. Karaivanova, (2006): Computational Grid: structure and Applications, Journal Avtomatica i Informatica (in Bulgarian), ISSN 0861-7562, 3/2006, year XL, September 2006, 40-43.
- Atkinson, R W, Yu D, Armstrong B, Pattenden S, Wilkinson P, Doherty R, Hea MR, Anderson HR., Concentration–Response Function for Ozone and Daily Mortality: Results from Five Urban and Five Rural U.K. Populations, Environ Health Perspect, 2012; 120:1411–1417
- Barlow J.F., “Progress in observing and modelling the urban boundary layer”, Urban Clim, 10, 216–240, 2014
- Binkowski, F.S., and Shankar, U., 1995: The Regional Particulate Model: Part I. Models description and preliminary results. J. Geophys. Res., 100(D12):26,191-26,209.
- Bornstein, R. D., “Mean diurnal circulation and thermodynamic evolution of urban boundary layer”, Modeling the Urban Boundary Layer, M. L. Kramer (Ed.), Amer Meteor Soc, 53–93, 1987
- Bott, A., 1989: A positive definite advection scheme obtained by nonlinear renormalization of the advective fluxes, Mon. Wea. Rev. 117: 1006-1015.
- Brunekreef B, Holgate S: Air pollution and health., Lancet 2002, 360:1233-1242
- Buitjes, P.J.H., van Loon, M., Schaap, M., Teeuwisse, S., Visschedijk, A.J.H. and Bloos, J.P. (2003) Project on the modelling and verification of ozone reduction strategies: contribution of TNO-MEP*, TNO-report, MEP-R2003/166, Apeldoorn, The Netherlands.
- Byun, D., 1998: Dynamically Consistent Formulation in Meteorological and Air Quality Models for Multi-scale Atmospheric Studies, J. Atm.Sci., in review.
- Byun, D., and J.K.S. Ching, 1999: Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, United States Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Washington, DC 20460, EPA-600/R-99/030.
- Byun, D., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F.S. Binkowski, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, and C. Jang, Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, 264-268. <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- Carter W. P. L. (1988) Appendix C Documentation of the SAPRC Atmospheric Photochemical Mechanism Preparation and Emissions Processing Programs for Implementation in Airshed Models. Final Report for California Air Resources Board Contract No. A5-122-32.
- Carter W. P. L. (1990) A detailed mechanism for the gas-phase atmospheric reactions of organic compounds. Atmos. Environ. 24A, 481-515.
- Carter W. P. L. (1996) Condensed atmospheric photooxidation mechanisms for isoprene. Atmos. Environ. 24, 4,275-4,290.
- Carter W. P. L. and Atkinson R. (1996) Development and evaluation of a detailed mechanism for the atmospheric reactions of isoprene and NOx. Int. J. Chem. Kinet. 28, 497-530.
- Carter W. P. L., Luo D. and Malkina I. L. (1997) Environmental Chamber Studies for Development of an Updated Photochemical Mechanism for Reactivity Assessment. Final Report for California Air Resources Board Contract No. 92-345, Coordinating Research Council, Inc., Project M-9 and National Renewable Energy Laboratory, Contract ZF-2-12252-0
- CEP (2003) Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina.
- Changnon S.A. Jr., “Inadvertent weather modification in urban areas, lessons for global climate change”, Bull Am MeteorolSoc, 73, 619–627, 1992
- CMAQ Modeling System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, 264-268.
- Chang J. S., Brost R. A. , Isaksen I. S. A., Madronich S., Middleton P., Stockwell W.R. and Waleck C.J. (1987) A three-dimensional Eulerian acid deposition model: physical concepts and formulation, J. geophys. Res., 92, 14,681 - 14,700.
- Ching, J., D. Byun, J. Young, F.S. Binkowski, J. Pleim, S. Roselle, J. Godowitch, W. Benjey, and G. Gipson, Science Features in Models-3 Community Multiscale Air Quality System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, 269-273.
- Da Silva, V. D. P. R., De Azevedo, P. V., Brito, R. S., Da Cunha Campos, J. H. B. (2010). Evaluating the urban climate of a typically tropical city of northeastern Brazil. Environmental Monitoring and Assessment, 161, 45–59.
- De Leeuw, F., Mol, W., (2005), Air Quality and Air Quality Indices: a world apart. ETC/ACC Technical Paper 2005/5 http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACC_TechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf
- Dudhia, J. (1993) A non-hydrostatic version of the Penn State/NCAR Mesoscale Model: validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. Mon. Wea. Rev. 121, 1493-1513.
- Emmanuel R., Fernando H.J.S., “Effects of urban form and thermal properties in urban heat island mitigation in hot humid and hot arid climates: the cases of Colombo, Sri Lanka and Phoenix, USA”, Clim Res 34, 241–251; doi:10.3354/cr00694, 2007
- EMEP/CORINAIR Emission Inventory Guidebook, (2006)
- EPA (2009). Technical assistance document for the reporting of daily air quality - the Air Quality Index (AQI). EPA- 454/B-09-001, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina 27711.EU (2007a). <http://ec.europa.eu/environment/air/legis.htm> (Accessed 2012/06/22).
- Elterman, L. 1968: Visible and IR Attenuation for Altitudes to 50 km; Air Force Cambridge Res. Lab, Bedford, MA, AFCRL-68-0153, 285.

- Etropolska I., Dimiter Syrakov, Kostadin Ganev, Maria Prodanova, Nikolai Miloshev, Kiril Slavov, Georgi Jordanov, (2010), A system for information and forecasting of air quality over Bulgaria, Proceedings of the 13th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes — 1-4 June 2010, Paris, France. ISBN: 2-8681-5062-4, 530-534
- European Parliament (2002) Directive 2002/3/EC of 12 February 2002 relating to ozone in ambient air, Official Journal of the European Communities (9.3.2002) L 67: 14-30.
- European Parliament (2008): Directive 2008/50/EC of the European Parliament and of the Council of 21 May 2008 on ambient air quality and cleaner air for Europe, Official Journal of the European Union (11.6.2008), L 152: 1-44.
- Fernando H.J.S., "Polimetrics: the quantitative study of urban systems (and its applications to atmospheric and hydro environments)", *Environmental Fluid Mechanics*, 8 (5), 397–409, 2008
- Fernando H.J.S., "Fluid dynamic of urban atmospheres in complex terrain", *Annu Rev Fluid Mech* 42:365–389, 2010
- Fernando H.J.S., Zajic D., Di Sabatino S., Dimitrova R., Hedquist B., Dallman A., "Flow, turbulence, and pollutant dispersion in urban atmospheres", *Phys Fluids*, 22, 051301(2010); doi:10.1063/1.3407662, 2010
- Foster J., C. Kesselmann, (1998), *The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure*, Morgan Kaufmann.
- Gadzhev G., G. Jordanov, K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev (2011a) Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region, Lecture Notes in Computer Sciences, Dimov, I. S. Dimova, and N. Kolkovska (Eds.): LNCS 6046, c. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 150-157
- Gadzhev, G., Syrakov, D., Ganev, K., Brandiyska, A., Miloshev, N., Georgiev, G., Prodanova, M., (2011b), Atmospheric composition of the Balkan region and Bulgaria. Study of the contribution of biogenic emissions, AIP Conference Proceedings, 1404, pp. 200-209.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Syrakov, D., Miloshev, N., Prodanova, M., (2012) Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria, *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 50, Nos. 1/2/3/4, 2012, p. 130-139.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., (2013a) Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, *Computers and Mathematics with Applications* 65, p. 402-422.
- Gadzhev G., K. Ganev, D. Syrakov, M. Prodanova and N. Miloshev (2013b) Some Statistical Evaluations of Numerically Obtained Atmospheric Composition Fields in Bulgaria, in the Proceedings of 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. 6-9 May 2013, Madrid, Spain, 373-377.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Atanasov, E., Miloshev, N., (2013c), Multi-scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria, NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security, 137, pp. 381-385.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., (2014a), Calculation Of Some Ozone Pollution Indeces For Bulgaria, *Ecology and Safety*, Volume 8, ISSN 1314-7234, pp: 384- 392
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., (2014b), Analysis of the processes which form the air pollution pattern over Bulgaria, Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 8353 LNCS, pp. 390-396.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., (2014c), Some basic facts about the atmospheric composition in Bulgaria - Grid computing simulations, Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 8353 LNCS, pp. 484-490
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., (2015a), Numerical study of the atmospheric composition climate of Bulgaria - Validation of the computer simulation results, *International Journal of Environment and Pollution*, 57 (3-4), pp. 189-201.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., (2015b), HPC simulations of the fine particulate matter climate of Bulgaria, Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 8962, pp. 178-186.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Syrakov, D., Prodanova, M., Georgieva, I., Georgiev, G., (2015c) Computer simulations of the atmospheric composition climate of Bulgaria, *Física de la Tierra*, Vol. 27 171-189
- Ganev K., 1981: Some results of the numerical modeling of mesometeorological processes in the Sofia field. (in Bulgarian), *Bulgarian Geoph. J.* v.VII, 3, 3-15.
- Ganev K., D. Yordanov, 1981: Some examples of admixture transport in the Sofia field. (in Bulgarian), *Bulgarian Geoph. J.* v.VII, 3, 16-28.
- Ganev K., D. Yordanov, 1983: On the formulation of the influence function problem in air pollution models with parameterized diffusion in the surface layer. (in Russian), *Bulgarian Geoph. J.* v. IX, 3, 25-35.
- Ganev K., D. Yordanov, 1984: On the parameterization of pollution transport in the surface layer in the numerical air pollution models. (in Russian), *Bulgarian Geoph. J.* v.X, 4, 10-18.
- Ganev K., R.Dimitrova, N.Miloshev 2004: Air flows and pollution transport in the Sofia valley under some typical background conditions, Proceedings of the XXVI International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Applications, 26.-30 May, 2003, Istanbul - Turkey, Kluwer Academic/Plenum Publ. Corp., 593-594
- Ganev K., D. Syrakov, M. Prodanova, E. Atanasov, T. Gurov, A. Karaivanova, N. Miloshev, H. Chervenkov, (2009), Grid Computing for Air Quality and Environmental Studies in Bulgaria, 23rd EnviroInfo 2009 Conference - Environmental Informatics and Industrial Environmental Protection: Concepts, Methods and Tools, Berlin, September 9th - 11th 2009, v.1, 141-149
- Giles, B. D., Balafoutis, C. H., & Maher, P. (1990). Too hot for comfort: the heatwaves in Greece in 1987 and 1988. *International Journal of Biometeorology*, 34, 98–104.
- Georgieva, E., Syrakov, D., Prodanova, M., Etropolska, I., Slavov, K. (2014): Evaluating the performance of WRF-CMAQ models in Bulgaria by means of the delta tool HARMO 2014 - 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Proceedings pp. 304-308
- Georgieva, I., (2014) Study of the air quality index climate for Bulgaria, Proc. of the international conference on numerical methods for scientific computations and advanced applications, may 19-22, 2014, Bansko, ISBN978-954-91700-7-8, p. 39-42.

- Georgieva I., G.Gadzhev, K. Ganey, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev (2015) Numerical study of the air quality in the city of Sofia – some preliminary results, International Journal of Environment and pollution, Vol. 57, Nos. 3/4, 162-174
- Gery M. W., Morris R. E., Greenfield S. M., Liu M. K., Whitten G. Z., and Fieber J. L. (1987) Development of a Comprehensive Chemistry Acid Deposition Model (CCADM). Final Report for Interagency Agreement DW 14931498, U. S. Environmental Protection Agency and U. S. Department of Interior.
- Gery M. W., Whitten G. Z., Killus J. P. and Dodge M. C. (1989) A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling. *J. geophys. Res.* 94, 12,925-12,956.
- Grell, G.A., Dudhia J., and Stauffer D.R. (1994) A description of the Fifth Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5). NCAR Technical Note, NCAR TN-398-STR, 138 pp.
- Health Aspects of Air Pollution. Results from the WHO Project Systematic Review of Health Aspects of Air Pollution in Europe, World Health Organization (WHO), 2004.
- Jacobson, M. and R.P. Turco, 1994: SMVGEAR: A Sparse-Matrix, vectorized Gear code for atmospheric models, *Atmos. Env.*, 28, 2991-3003.
- Lurmann F. W., Carter W. P. L. and Coyner L. A. (1987) A Surrogate Species Chemical Reaction Mechanism for Urban Scale Air Quality Simulation Models Volume 1. EPA-600/3-87- 014a
- Miloshev N., (1996). National CORINAIR Inventory for 1995, Executive Environment Agency - MoEW, 1997. 256/260/
- Miloshev N., (1997). National CORINAIR Inventory for 1995, Executive Environment Agency - MoEW, 1997.
- Pierce, T., Geron, C., Bender, L., Dennis, R., Tennyson, G., and Guenther, A., (1998): The Influence of Increased Isoprene Emissions on Regional Ozone Modeling, *Journal of Geophysical Research*, 103, pp. 25611–25629.
- Pleim, J.E., and Chang, J.S., 1992: A Non-Local Closure Model in the Convective Boundary Layer. *Atmos. Env.* 26A: 965-981.
- Roth M., "Review of atmospheric turbulence over cities", *Q J R MeteorolSoc*, 126, 941–990,2000
- Shamarock et al., (2007) "A description of the Advanced Research WRF Version 2", http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
- Schaap, M., Timmermans, R.M.A., Roemer, M., Boersen, G.A.C., Builtjes, P.J.H. Sauter, F.J., Velders, G.J.M. and Beck, J.P. (2008) „The LOTOS-EUROS model: description, validation and latest 257/260 developments‘, *International Journal of Environment and Pollution*, 32, No. 2, pp.270–290.
- Schwede, D., G. Pouliot, and T. Pierce (2005): Changes to the Biogenic Emissions Inventory System Version 3 (BEIS3), Proc. of 4th Annual CMAS Models-3 Users's Conference, September 26-28, 2005, Chapel Hill, NC.
- Smolarkiewicz, P.K., 1983: A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion. *Mon. Wea. Rev.* 111: 479-486.
- Stockwell W.R. (1986) A homogeneous gas phase mechanism for use in a regional acid deposition model, *Atmos. Environ.*, 20, 1,615-1,632.
- Stockwell W. R., Middleton P. and Chang J. S. (1990) The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling. *J. geophys. Res.* 95 (d10), 16,343-16,367.
- Syrakov D., K. Ganey, M. Prodanova, N. Miloshev, G. Jordanov, E. Katragkou, D. Melas, A. Poupkou and K. Markakis, (2009). Background Pollution Forecast over Bulgaria, Large-Scale Scientific Computing, LSSC 2009, Springer LNCS 5910, 531-537
- Syrakov D., V. Spiridonov, M. Prodanova, A. Bogatchev, N. Miloshev, K. Ganey, E. Katragkou, D. Melas, A. Poupkou, Kostas Markakis, R. San Jose and J. L. Pérez, (2011a), A system for assessment of climatic air pollution levels in Bulgaria: description and first steps towards validation, *Int. J. Environment & Pollution* Vol. 46, Nos. 1/2, 8-42, ISSN (Online): 1741-5101 - ISSN (Print): 0957-4352, IF 0.706
- Syrakov D., M. Prodanova, I. Etropolska, K. Ganey, N. Miloshev, K. Slavov, G. Jordanov, (2011b) Automated system for chemical weather forecast in Bulgaria, Bulgarian Journal of Meteorology and Hydrology, v. 16, No. 1, pp.30-40.
- Syrakov D., K. Ganey, M. Prodanova, N. Miloshev, K. Slavov, (2012), Fine resolution modeling of climate change impact on future air quality over Bulgaria, 32st NATO/SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application 7-11 May, 2012, Utrecht, The Netherlands. (on a CD)
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganey, K., Miloshev, N., Ljubenov T., (2013) Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to Sofia city, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1561, p. 120-132, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4827221>
- Syrakov D., M. Prodanova, I. Etropolska, K. Slavov, K. Ganey, N. Miloshev, and T. Ljubenov (2014): A Multy-Domain Operational Chemical Weather Forecast System, in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, pp. 413–420, DOI: 10.1007/978-3-662-43880-0_55, © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014
- Syrakov, D., Prodanova, M., Georgieva, E., Etropolska, I., Slavov, K. (2014): Impact of nox emissions on air quality simulations with the Bulgarian WRF-CMAQ modeling system Proceedings of the HARMO 2014 - 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Varna, Bulgaria, pp 187-190.
- Syrakov, D., , M. Prodanova, , E. Georgieva, , I. Etropolska, , K. Slavov (2015): Simulation of European air quality by WRF-CMAQ models using AQMEII-2 infrastructure *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 293, pp 232–245.
- Todorova A., Syrakov D., Gadjev G., Georgiev G., Ganey K., Prodanova M., Miloshev N., Spiridonov V., Bogatchev A., Slavov K. (2010) Grid computing for atmospheric composition studies in Bulgaria, *Earth Sci Inform* 3: 259–282, DOI 10.1007/s12145-010-0072-1., IF=0.657
- U.S. Standard Atmosphere, 1976: National Oceanic and Atmospheric Administration, U.S. Government Printing Office: Washington, DC, NOAA-S/T76-1562.
- Vestreng V., (2001), Emission data reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the spatial distribution of emissions. Meteorological Synthesizing Centre - West, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway, Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1/2001.
- Vestreng V., K. Breivik, M. Adams, A. Wagner, J. Goodwin, O. Rozovskaya, J.M. Pacyna, (2005), Inventory Review 2005 (Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive), Technical Report MSC-W 1/2005, EMEP

- Visschedijk A. J. H., P.Y.J. Zandveld and H.A.C. Denier van der Gon, (2007), A High Resolution Gridded European Emission Database for the EU Integrate Project GEMS, TNO-report 2007-A-R0233/B, Apeldoorn, The Netherlands.
- Walcek, C.J., and Taylor, G.R., 1986: A Theoretical Method for Computing Vertical Distributions of Acidity and Sulfate Production within Cumulus Clouds. *J. Atmos. Sci.*, 43(4): 339-355.
- Wesely, M.L., 1989: Parameterization of surface resistance to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models, *Atm. Env.*, 23, 1293-1304.
- WHO - Fact Sheet Number 187, World Health Organization , 2000
- WHO - Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulphur dioxide. Global Update 2005. Summary of risk assessment, WHO Regional Office for Europe, Copenhagen;
- Национална методика за инвентаризация на емисиите в атмосферата, утвърдена със Заповед № РД- 299/16.06.2000 на Министъра на Околната среда и водите.
- Гаджев Г., 2013, Мултимасшабно моделиране на пренос на замърсители в атмосферата, Дисертация за придобиване на образователната и научна степен “доктор” по специалност „Физика на океана, атмосферата и околноземното пространство” шифър 01.04.08
- Етрополски Е., 2015 Българска система за прогноза на химическото време – версии, дизайн, визуализация, верификация (валидация) Дисертация за придобиване на образователната и научна степен “доктор” в професионално направление 4.1. Физически науки (Метеорология).

<http://www.wrf-model.org/>
http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/user_guide_V3/contents.html
http://www.dtcenter.org/wrf-nmm/users/docs/user_guide/V3/index.htm
https://www.cmascenter.org/smoke/documentation/2.6/SMOKE_v26_manual.pdf
<http://www.airquality.co.uk/archive/standards.php#band>
<http://www.citeair.eu/>
http://www.airqualitynow.eu/about_indices_definition.php
[http://eur-lex.europa.eu/legal-content/BG/TXT/PDF/?uri=CELEX:32008L0050&from=BG](http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2002:067:0014:0030:EN:PDF)
http://www.moev.government.bg/wp-content/uploads/filebase/Air/Direktivi/Dir_2001_81_EC_bg.pdf
<https://unfccc.int/resource/docs/convkp/conveng.pdf>
<https://bg.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D0%BE%D1%84%D0%B8%D1%8F#.D0.9A.D0.BB.D0.B8.D0.BC.D0.B0.D1.82>
<http://www.cmascenter.org/>
<http://www.smoke-model.org/>
www.usgs.gov
<http://eea.government.bg/bg/output/daily/pollutants/n2o.html>
<http://en.wikipedia.org/wiki/Ozone>
<http://eea.government.bg/bg/output/daily/pollutants/s2o.html>
<http://eea.government.bg/bg/output/daily/pollutants/pm.html>
<http://www.euro.who.int/en/health-topics/environment-and-health/air-quality/publications/pre2009/health-aspects-of-air-pollution-results-from-the-who-project-systematic-review-of-health-aspects-of-air-pollution-in-europe>
http://sofia.bg/smet/Programa_OS_1.pdf

Списък на съкращенията

<u>АГС</u>	<u>Атмосферен Границен Слой</u>
<u>АМ</u>	<u>Автомагистрала</u>
<u>АИС</u>	<u>Автоматична измервателна станция</u>
<u>БАН</u>	<u>Българска Академия на Науките</u>
<u>ВС</u>	<u>Въздушна среда</u>
<u>ГГС</u>	<u>Градски граничен слой</u>
<u>ГОТ</u>	<u>Градския остров на топлина</u>
<u>ДОАС</u>	<u>Dedicated outdoor air system - Система за измерване състоянието на въздуха</u>
<u>ЕАОС</u>	<u>Европейска агенция за околната среда</u>
<u>ЕС</u>	<u>Европейски Съюз</u>
<u>ИАОС</u>	<u>Изпълнителна Агенция по Околна Среда</u>
<u>ИКВ</u>	<u>Индекс за Качество на Въздуха</u>
<u>КАВ</u>	<u>Качество на Атмосферният Въздух</u>
<u>КВ</u>	<u>Качество на Въздуха</u>
<u>КТЗВДР</u>	<u>Конвенцията за трансгранично замърсяване на въздуха на далечни разстояния</u>
<u>МОСВ</u>	<u>Министерството на Околната Среда и Водите</u>
<u>НИГГГ</u>	<u>Национален Институт по Геофизика, Геодезия и География</u>
<u>НИМХ</u>	<u>Национален Институт по Метеорология и Хидрология</u>
<u>НСИ</u>	<u>Национален Статистически Институт</u>
<u>ООН</u>	<u>Организация на Обединените Нации</u>
<u>ПДК</u>	<u>Пределно Допустими Концентрации</u>
<u>РКОНИК</u>	<u>Рамкова Конвенция на ООН по Изменение на Климатата</u>
<u>СА</u>	<u>Състав на атмосферата</u>
<u>СЗО</u>	<u>Световна Здравна Организация</u>
<u>СЧН</u>	<u>Средно Часова Норма</u>
<u>СГН</u>	<u>Средно Годишна Норма</u>
<u>СДН</u>	<u>Средно Дневна Норма</u>
<u>ТЕЦ</u>	<u>Топло Електро Центrale</u>
<u>AERO</u>	<u>Aerosol processes - Аерозолни процеси</u>
<u>AFWA</u>	<u>Air Force Weather Agency - Агенция на военновъздушните сили и времето</u>

<u>AQ</u>	<u>Air Quality - Качество на въздуха</u>
<u>AQI</u>	<u>Air Quality Index - Индекс за Качество на въздуха</u>
<u>CAPS</u>	<u>Center for Analysis and Prediction of Storms - Център за анализ и изследване на бурите</u>
<u>CLDS</u>	<u>Clouds - Облачните процеси и водната химия</u>
<u>CMAQ</u>	<u>Community Multiscale Air Quality System - Химичен транспортен модел</u>
<u>CORINAIR</u>	<u>The Core Inventory of Air Emissions in Europe - Инвентаризация на емисиите във въздуха в Европа</u>
<u>CPRM</u>	<u>Coarse Particulate Matter - Едри Прахови частици</u>
<u>CHEM</u>	<u>Chemical processes - Химични процеси</u>
<u>DDEP</u>	<u>Dry Deposition - Сухо отлагане</u>
<u>EMEP</u>	<u>European Monitoring and Evaluation Program - Европейска програма за мониторинг и оценка на емисиите</u>
<u>EMC</u>	<u>Environmental Modeling Center - Центъра за моделиране на околната среда</u>
<u>EMIS</u>	<u>Emissions - Емисии</u>
<u>EPER</u>	<u>European Pollutant Emission Register - Европейския регистър на емисиите</u>
<u>ESRL</u>	<u>Earth System Research Laboratory - Лаборатория за изследване на земята</u>
<u>FAA</u>	<u>Federal Aviation Administration - Федералната авиационна администрация</u>
<u>FPRM</u>	<u>Fine Particulate Matter - Финни Прахови частици</u>
<u>GMT</u>	<u>Greenwich Mean Time - време по Гринуич</u>
<u>GNOY</u>	<u>Азотни съединения</u>
<u>HADV</u>	<u>Horizontal Advection - Хоризонтална адвекция</u>
<u>HDIF</u>	<u>Horizontal Diffusion - Хоризонталната дифузия</u>
<u>IPCC</u>	<u>Intergovernmental Panel on Climate Change - Методиката е стандарт за докладване на емисиите от парникови газове</u>
<u>LSM</u>	<u>Land Surface Model - Модел за земната повърхност</u>
<u>MAX</u>	<u>Maximum - Максимални</u>
<u>NCAR</u>	<u>National Center for Atmospheric Research - Национален център за атмосферни изследвания</u>
<u>NCEP</u>	<u>National Centers for Environmental Prediction - Национален център за прогноза на околната среда</u>
<u>NOAA</u>	<u>National Oceanic and Atmospheric Administration - Национална океанска и атмосферна администрация</u>
<u>NWP</u>	<u>Numerical Weather Prediction - Числена прогноза на времето</u>

<u>PBL</u>	<u>Planetary Boundary Layer - Ппланетарени граничен слой</u>
<u>PM</u>	<u>Particulate Matter - Прахови частици</u>
<u>PMC</u>	<u>Particulate Matter Coarse - Едри прахови частици</u>
<u>SNAP</u>	<u>Selected Nomenclature of Air Pollutants</u>
<u>SN</u>	<u>SNAP - Selected Nomenclature of Air Pollutants</u>
<u>US EPA</u>	<u>United States Environmental Protection Agency - Американска агенция за опазване на околната среда</u>
<u>SMOKE</u>	<u>Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System - Емисионен модел</u>
<u>TNO</u>	<u>Nederland's Organization voor Toegepast Natuurwetenschappelijk Onderzoek - Netherlands Organisation for Applied Scientific Research - Нидерландска организация за приложни научни изследвания</u>
<u>UNFCCC</u>	<u>UN Framework Conventionon Climate Change - Конвенцията на ООН за промяна на климата</u>
<u>USGS</u>	<u>US Geological Survey - Американска база данни за релефа и подложната повърхност</u>
<u>VADV</u>	<u>Vertical Advection - Вертикалната адвекция</u>
<u>VDIF</u>	<u>Vertical Diffusion - Вертикалната дифузия</u>
<u>VOC</u>	<u>Volatile organic compound - Летливи Органични Съединения</u>
<u>WHO</u>	<u>World Health Organization - Световна Здравна Организация</u>
<u>WRF</u>	<u>Weather Research and Forecast model - Модел за числена прогноза на времето</u>

ПРИНОСИ

в дисертационния труд на Ивелина Христова Георгиева на тема „Локални процеси на пренос и химични трансформации в атмосферата“

1. Генериран е ансамбъл от компютърни симулации, който е достатъчно **детайлен, представителен, надежден и изчерпателен**, представлящ състава на атмосферата и локалните процеси на пренос за избрана градска среда – София град. Генеририаният ансамбъл може да се разглежда като характеристика на климата на замърсяване, а симулациите могат да се използват за оценки на замърсяването на локално ниво;
2. Анализът на резултатите от компютърните симулации на осреднените по ансамбъл приземни концентрации на замърсители за територията на град София и за отделни точки от областта, тяхната пространствена, денонощна и сезонна изменчивост, границите в които те се изменят с различна вероятност и пр. позволи да бъдат разкрити някои от основните факти относно климата на атмосферно замърсяване в Столицата.
3. Пресметнат беше **Индексът за качество на атмосферния въздух (AQI)**, който отразява влиянието на качеството на атмосферния въздух върху качеството на живот и здравия риск в региона.
4. Съпоставянето на резултатите от петте емисионни сценария позволи да бъдат оценени, в климатичен аспект осреднените по целия ансамбъл приноси на източниците от съответните категории към общата картина на замърсяване в областта (София град) с тяхната пространствена, денонощна и сезонна изменчивост. Резултатите от това изследване могат да бъдат пряко използвани при формулирането на краткосрочни (текущи) решения и дългосрочни стратегии за намаляване на замърсяването на въздуха.
5. Оценена е ролята на всеки един от отделните процеси при формиране на атмосферното замърсяване в Столицата. Чрез осредняването на тези приноси по ансамбъл беше изяснена тяхната пространствена, денонощна и сезонна изменчивост. Анализа на тези процеси, на тяхното взаимодействие и принос е изключително важно за обяснение на общата картина на замърсяване в града и отделни негови точки.

Proceedings of
the International
Conference

Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications

(NMSCAA'14)

In cooperation
with

siam

Editor

**Krassimir
Georgiev**

**May 19 – 22,
2014,
Bansko,
Bulgaria**

**Sofia
2014**



**Institute of Information and Communication Technologies
Bulgarian Academy of Sciences**

Proceedings of the International Conference

This book contains extended abstracts (short communications) of some of the presented papers during the International Conference on "Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications" (NMSCAA'14), May 19-22, 2014, Bansko, Bulgaria. The conference was organized by the Institute of Information and Communication Technologies, Bulgarian Academy of Sciences in cooperation with Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) and devoted to the 60th anniversary of the Bulgarian Academy of Sciences.

Numerical Methods for Scientific

Computations and Advanced Applications

(NMSCAA'14)

May 19-22, 2014, Bansko, Bulgaria

Currently, prof. Krassimir Georgiev is a Director of the Institute of Information and Communication Technologies at the Bulgarian Academy of Sciences and Head of the Department of Scientific computing in the same institute. He is an eminent scientist and university lecturer. Professor Georgiev is an author of two monographs and more than 140 papers published in high ranked international journals and proceedings of conferences. He is a member of the Editorial Boards of:

* Numerical Linear Algebra with Applications (NLA),

* Scalable Computing: Practice and Experience (SCPE),

Krassimir Georgiev (Editor)



Institute of Information and Communication Technologies
Bulgarian Academy of Sciences

In cooperation with



Sofia, 2014

Proceedings of the International Conference
Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications
(NMSCAA'14)
May 10-12, 2014, Bansko, Bulgaria

Klausen (Editor)

Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications
(NMSCAA'14)

Proceedings of the International Conference

©2014 by Demetra

ISBN: 978-954-91700-7-8

Printed in Sofia, Bulgaria
Cover design: Boris Staikov
Printing and binding: Demetra Ltd.

Air Quality Index Evaluations for Bulgaria

Ivelina Georgieva

1 Introduction

In communication with the general public providing information on the actual air quality is not meaningful to present concentration values unless the concentrations are related to the effect levels. Frequently this is done by converting the concentration into a dimensionless scale which is also associated with an intuitive color code (from green to red) and a linguistic description (e.g. from very good to very poor). Commonly the reference levels used in the conversion are based on health-protection related limit, target or guideline values set by the EU, at national or local level or by the WHO. For describing the ambient pollutant mix, an overall air quality index (AQI) is constructed. In calculating such an overall AQI, firstly for each individual pollutant a sub-index is calculated. The overall index is set to the highest value of each of the pollutant considered.

The AQI has become part of the information routinely provided to the public. The AQI makes it possible to describe the air quality in a simple, understandable way.

2 Computer simulated atmospheric composition

Recently extensive studies for long enough simulation periods and good resolution of the atmospheric composition status in Bulgaria have been carried out using up-to-date modeling tools and detailed and reliable input data [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9].

The simulations aimed at constructing of ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of Bulgaria - typical and extreme features of the special/temporal behavior, annual means and seasonal variations, etc.

3 Some AQI examples

Utilization of the ensemble for studying the AQI climate in Bulgaria is the goal of the present work.

The AQI, calculated in the frame of Bulgarian Chemical Weather Forecast System [10, 11], ver.3, which follows the UK Air Quality Index [12] is used in the present work as well. Due to the limited volume of the present abstract only few examples, illustrating the AQI climate in Bulgaria will be demonstrated.

Figure 1, for example, demonstrates the seasonal and diurnal variation of the recurrence of different AQI categories, averaged for the territory of Bulgaria. As it can be seen AQI2 and 3 are with highest recurrence, while all other AQI are much less

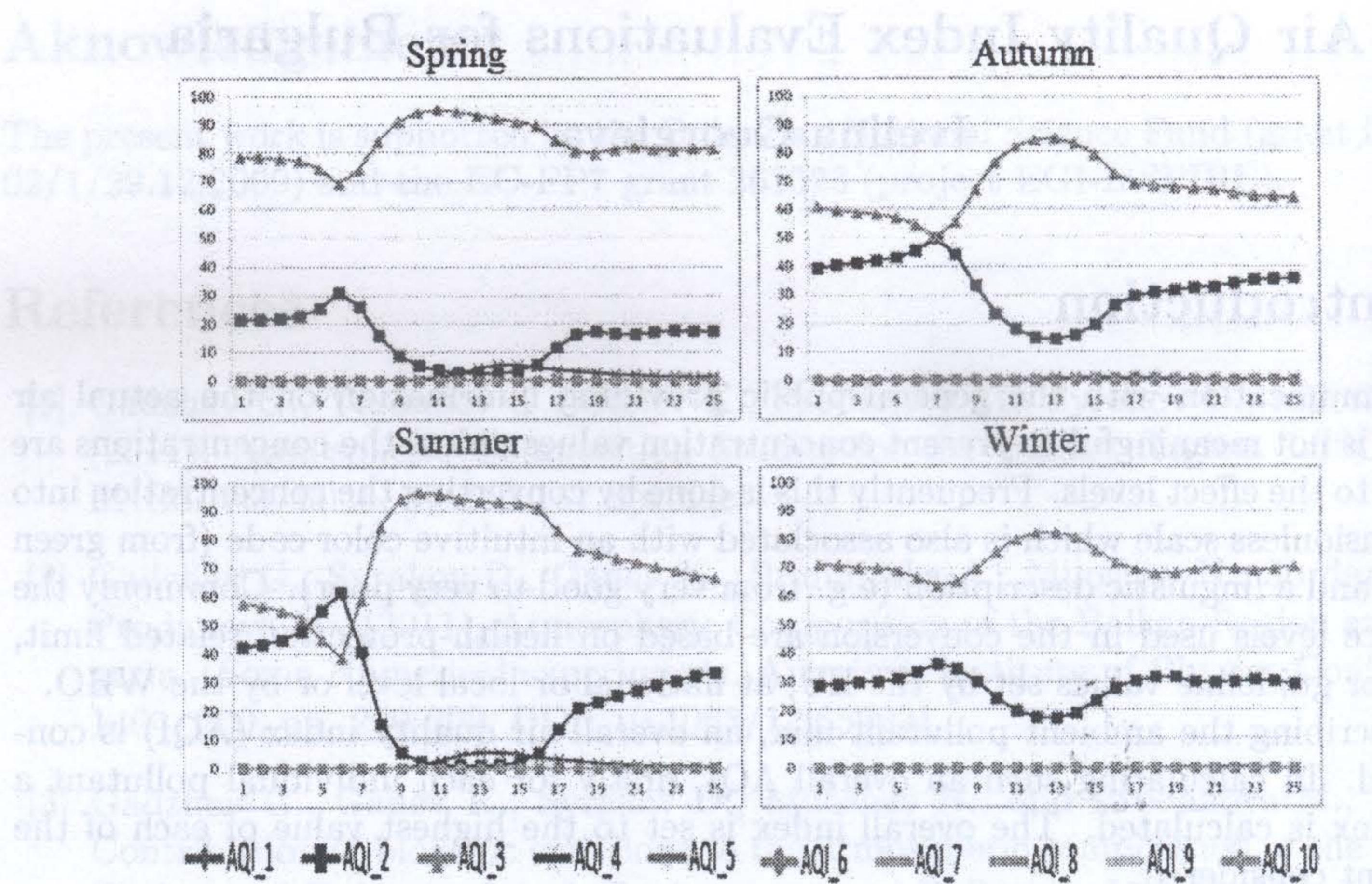


Figure 1: Diurnal and seasonal variations of the averaged over Bulgaria recurrence [%] of the different AQI.

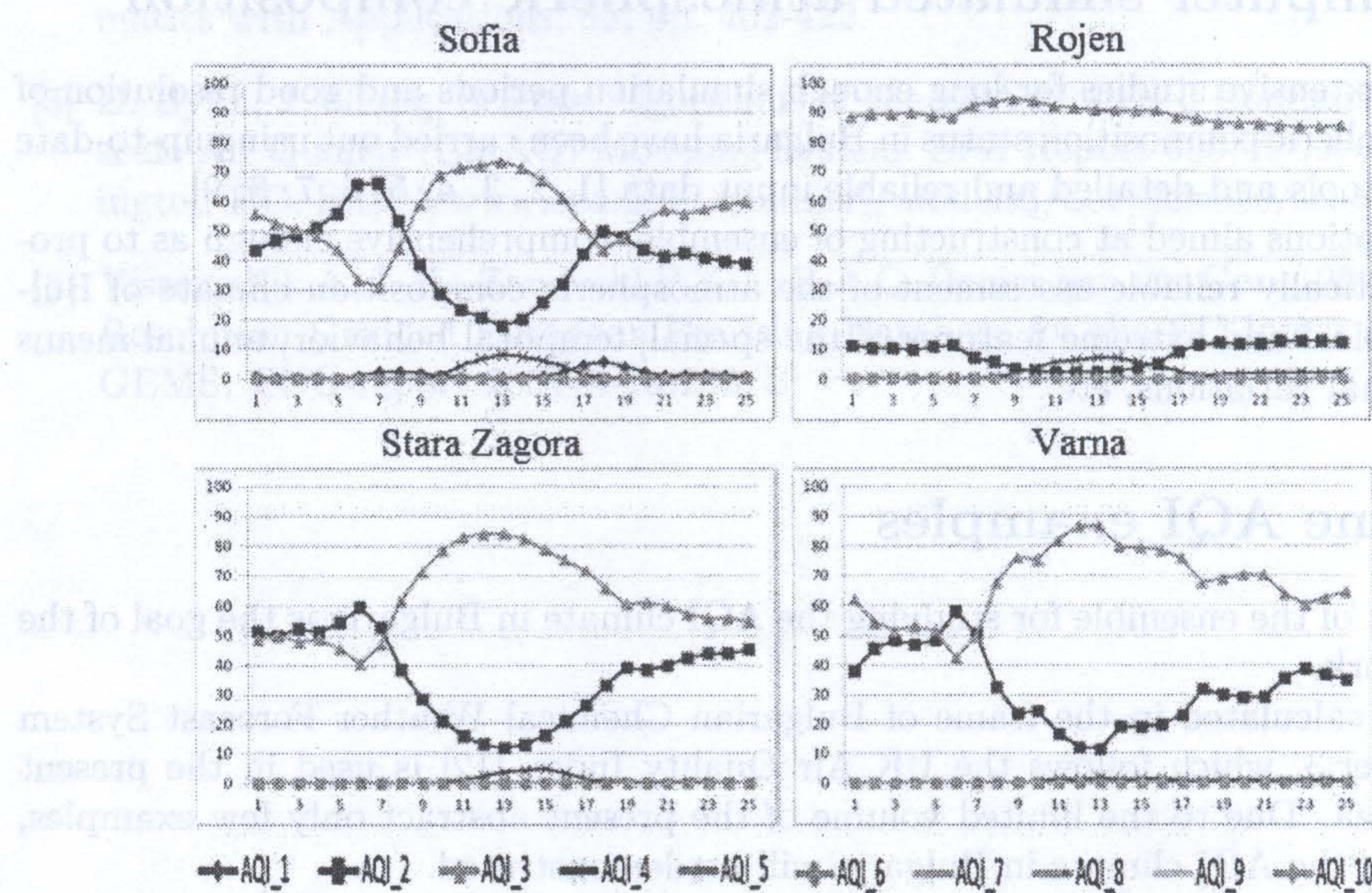


Figure 2: Diurnal variations of the annually averaged recurrence [%] of the different AQI for different points

probable. Exceptions can be seen at noon for spring and summer, when probability of AQI4 becomes higher than the one for AQI2.

The AQI probabilities have not only seasonal and diurnal, but also spatial variability. Figure 2 demonstrates the annual AQI recurrence for different points. As can be seen AQI2 and 3 have highest impact, while all others AQI are with negligible impact. AQI4 probability has local maximum at midday for Sofia, Rojen and Stara Zagora. The general conclusion that can be made is that the air quality status of Bulgaria is rather good (evaluated with a spatial resolution of 3km) - the recurrence of high AQI values is close to zero. It should be also noted that the dominant pollutant - the one that determines the AQI value is mostly the surface ozone.

Acknowledgements

The present work is supported by the Bulgarian National Science Fund (grant DCVP-02/1/29.12.2009) and the EC-FP7 grant 261323 (project EGI-InSPIRE).

References

- [1] Gadzhev G., Yordanov G., Ganev K., Prodanova M., Syrakov D., Miloshev N., (2011), Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region. LSSC 2010, LNCS, vol. 6046, pp.150-157, Springer
- [2] Gadzhev G., Syrakov D., Ganev K., Brandiyska A., Miloshev N., Jordanov G., Prodanova M., (2011), Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria - Some Numerical experiments. American Institute of Physics Conf. Proc. 1404, 200, pp. 200-209, DOI: 10.1063/1.3659921
- [3] Gadzhev G., Ganev K., Syrakov D., Miloshev N., and Prodanova M., (2012), Contribution of biogenic emissions to the atmospheric composition of the Balkan Region and Bulgaria, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 50, Nos. 1/2/3/4, pp.130-139, DOI: 10.1504/IJEP.2012.051187.
- [4] Gadzhev G., Ganev K., Miloshev N., Syrakov D., Prodanova M., (2013), Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, Computers and Mathematics with Applications, 65, pp. 402-422.
- [5] Gadzhev G., K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, E. Atanasov, N. Miloshev, (2013), Multi-scale atmospheric composition modelling for Bulgaria, NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security 137 , pp. 381-385 (CD)
- [6] Ganev K., D. Syrakov, A. Todorova, G. Gadzhev, G. Jordanov, N. Miloshev, M. Prodanova, (2009), Joint analysis of dilution and transformation processes of air pollution from the road and ship transport. 7th International Conference on Air Quality Science and Application Istanbul, 24-27 March 2009. (on a CD)

- [7] Ganev K., Syrakov D., Prodanova M., Miloshev N., Jordanov G., Gadjev G., and Todorova A., 2009, Atmospheric composition modeling for the Balkan region, ISBN: 978-975-403-510-0, pp. 77-85
- [8] Todorova A., D. Syrakov, G. Gadjhev, G. Georgiev, K. Ganev, M. Prodanova, N. Miloshev, V. Spiridonov, A. Bogatchev, K. Slavov, (2010), Grid computing for atmospheric composition studies in Bulgaria. Earth Sci. Inform. ISSN 1865-0473 Vol.3, No.4, pp. 259-282.
- [9] Todorova A., Gadzhev G., Jordanov G., Syrakov D., Ganev K., Miloshev N., Prodanova M., (2009), Application of the US EPA models 3 sysytem for numerical simulations of high PM10 levels episodes.
- [10] Syrakov D., Etropolska I., Prodanova M., Ganev K., Miloshev N., Slavov K., (2012), Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1487, pp. 88 - 94; DOI: 10.1063/1.4758945.
- [11] Syrakov D., M. Prodanova, I. Etropolska, K. Ganev, N. Miloshev, K. Slavov, G. Jordanov, 2011 Automated system for chemical weather forecast in Bulgaria, Bulgarian Journal of Meteorology and Hydrology, v. 16, No. 1, pp.30-40. de Leeuw F., W. Mol, (2005), Air Quality and Air Quality Indices: a world apart.ETC/ACC Technical Paper 2005/5
- [12] de Leeuw F., W. Mol, (2005), Air Quality and Air Quality Indices: a world apart. ETC/ACC Technical Paper 2005/5
http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACC_TechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf.

Computer simulations of the atmospheric composition climate of Bulgaria

Georgi GADZHEV¹, Kostadin GANEV¹, Dimiter SYRAKOV²,
Maria PRODANOVA², Ivelina GEORGIEVA¹, Georgi GEORGIEV¹

¹National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences.
Department of Geophysics.

²National Institute of Meteorology and Hydrology, Bulgarian Academy of Sciences.
Atmospheric Physics and Ecology.
ggadjev@geophys.bas.bg

Recibido: 15/04/2015

Aceptado: 04/09/2015

Abstract

Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Bulgaria have been recently performed. The US EPA Model-3 system was chosen as a modelling tool. As the NCEP Global Analysis Data with 1 degree resolution was used as meteorological background, the MM5 and CMAQ nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 3 km resolution over Bulgaria. The TNO emission inventory was used as emission input. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE. The simulations were carried out for years 2000-2007.

The numerical experiments have been carried out for different emission scenarios, which makes it possible the contribution of emissions from different source categories to be evaluated. The Models-3 “Integrated Process Rate Analysis” option is applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation.

The obtained ensemble of numerical simulation results is extensive enough to allow statistical treatment – calculating not only the mean concentrations and different source categories contribution mean fields, but also standard deviations, skewness, etc. with their dominant temporal modes (seasonal and/or diurnal variations). Thus some basic facts about the atmospheric composition climate of Bulgaria can be retrieved from the simulation ensemble.

Key words: air pollution modelling, US EPA models-3 system, multi-scale modelling, emission scenarios, process analysis

Simulaciones computacionales del clima de Bulgaria y su composición atmosférica

Resumen

Se han realizado simulaciones numéricas con el sistema US EPA Model-3 sobre todo el territorio de Bulgaria con una resolución horizontal de hasta 3 km en el periodo 2000-2007.

Los input necesarios para activar el sistema US EPA Model-3 son, básicamente dos, datos meteorológicos del NCEP (NCEP Global Analysis Data) con 1° de resolución, y el inventario de emisiones del TNO. Aunque las emisiones biogénicas de los compuestos orgánicos volátiles (COV's) se estimaron mediante modelo SMOKE. Para poder introducir las emisiones al modelo US EPA Model-3 se realizó un procesado previo que permitía determinar sus perfiles temporales y las especificaciones para cada una de las emisiones. En las simulaciones realizadas se consideraron diferentes escenarios de emisiones de diferentes tipos de fuente.

Para ver la contribución de cada los procesos dinámicos y químicos en los niveles de contaminación se consideró la opción “Integrated Process Rate Analysis” del sistema US EPA Model-3.

Los resultados obtenidos de las simulaciones se analizaron estadísticamente y se determinaron las concentraciones medias, la contribución de las diferentes fuentes a los campos medios, la desviación estándar, el sesgo, ..., así como los modos temporales dominantes (variaciones estacionales y/o diurnas).

Palabras clave: modelización de contaminación atmosférica, sistema US EPA models-3, modelización multiescala, escenarios de emisiones, análisis de los procesos.

Contents: 1. Introduction. 2. Brief description of the computer simulations. 3. Validation of the computer simulation results. 4. Some examples, comments and discussion. 5. Conclusions. Acknowledgements. References.

Normalized reference

Gadzhev G., Ganev K., Syrakov D., Prodanova M., Georgieva I., Georgiev G. (2015) Computer simulations of the atmospheric composition climate of Bulgaria. *Física de la Tierra*, Vol 27, 175-193.

1. Introduction

Recently extensive studies for long enough simulation periods and good resolution of the atmospheric composition status in Bulgaria have been carried out using up-to-date modeling tools and detailed and reliable input data (Gadzhev et al. 2011; 2012; 2013 a,b; 2014 a,b,c).

The simulations aimed at constructing of ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of Bulgaria – typical and extreme features of the special/temporal behavior, annual means and seasonal variations, etc.

The present paper, in which a brief review of the studies, will focus on some important characteristics of the atmospheric composition climate of Bulgaria – the concentrations of different compounds and the evaluation of the contribution of different emission categories to the overall air pollution in the country.

The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal behavior is by all means important. That is why the one of the important issues in the present paper is to present some evaluations of the contribution of different processes to the regional pollution over Bulgaria.

2. Brief description of the computer simulations

The simulations are based on the US EPA Model-3 system. The system consists of three components: MM5 (Dudhia 1993, 1996; Dudhia et al. 2005; Grell et al. 1994), used as meteorological pre-processor, CMAQ (Byun et al. 1998; Byun and Ching 1999), the Chemical Transport Model of the system and SMOKE (CEP 2003) – the emission pre-processor of Models-3 system.

The CMAQ “Integrated Process Rate Analysis” option was applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution pattern

formation. The procedure allows the concentration change for each compound for an hour Δc to be presented as a sum of the contribution of the processes, which determine the concentration.

The large scale (background) meteorological data used by the study is the NCEP Global Analysis Data with $1^\circ \times 1^\circ$ resolution. The MM5 and CMAQ nesting capabilities are used to downscale the problem to a 3 km horizontal resolution for the innermost domain (Bulgaria). The simulations are carried out for fifteen sigma levels, the upper one being at approximately 16070m.

The TNO high resolution emission inventory (Visschedijk et al., 2007) is exploited. A detailed description of the emission modeling is given in Gadzhev et al. (2013a).

The study is based on a large number of numerical simulations carried out day by day for years 2000-2007 and five emission scenarios – with all the emissions and with biogenic emissions (categorie BB in Fig. 5 and 6), emissions from energetics (categorie SN_1), road transport (categorie SN_7), and none industrial combustion reduced (categorie SN_2). This makes it possible to evaluate the contribution of different emission categories to the formation of the overall atmospheric composition pattern. Performing extensive simulations of this kind with up to date highly sophisticated numerical models obviously requires large computer resource. That is why grid computing (Foster and Kesselmann, 1998; Atanasov. et al., 2006) was applied for the present simulations. Details about the performance of this grid application can be seen in Gadzhev et al. (2013a).

3. Validation of the computer simulation results

The computer simulations were validated by comparison with data of the pollution levels, measured by the Bulgarian National Network for Air Quality Control (Gadjhev 2014c).

Scatter diagrams of simulated and measured ozone levels for some arbitrarily taken stations are demonstrated in Gadjhev (2014c). They show that almost all the points are within the FA2 margins, which means that the condition for no more than 50% uncertainty of the hourly ozone values, defined in the respective European directive (European Parliament 2002) is fulfilled. The simulated results tend to underestimate the high ozone values and to overestimate the low ones.

The running 8-hour average values for simulated and measured ozone concentrations have been also calculated. The respective scatter diagrams (Gadjhev 2014c) show that the agreement between the simulated and measured running 8-hour average ozone values is much better in comparison to the hourly values with less dispersion around the ideal correspondence line and the better correlation is obvious. The above quoted requirement for less than 50% uncertainty is strictly fulfilled.

Some statistical evaluations of the O₃ and NO₂ simulations performance are shown in Tables 1, 2 for 14 monitoring stations, shown in Figure 1. The total number of stations, placed in 34 settlements all over the country - urban, living, high traffic, and industrial areas is 53. The stations, shown in Fig. 1 are chosen,

because they only have ozone measurements and the data records for the simulated period are comprehensive enough.



Figure 1. Map with the names, codes and emplacement of the used Bulgarian stations (U-urban, S-suburban, R-rural) 12U - Varna, 13S - Devnia, 41U - Dimitrovgrad, 43U - Vratza, 44S - Burgas, 45S - Ruse, 49S - Pernik, 50S - Krasno Selo - Sofia, 51U - Plovdiv, 52S - Drujba - Sofia, 53R - Rojen peak, 54U - Orlov most - Sofia, 55U - Stara Zagora, 56S - Burgas.

Table 1. Some statistical evaluations of the simulated ensemble with measured data for O₃: MP, MO – mean simulated and observed concentrations, NMB – normalised mean bias, NRMSE – normalised root mean square error, FA2 - % of cases within FA2 margins, PCC – correlation coefficient, NMSD – normalised mean square deviation

Station	MP µg/m ³	MO µg/m ³	NMB %	NRMSE %	FA2 %	PCC	NMSD %
12U	71.45	72.41	1.35	11.27	87.30	0.45	-41.04
13S	72.49	70.25	-2.56	12.71	91.45	0.49	-45.36
41U	72.92	71.67	-1.72	11.71	90.76	0.67	-32.95
43U	69.68	76.69	10.05	15.19	82.77	0.52	-44.87
44S	73.72	72.47	-1.70	12.46	88.26	0.72	-44.54
45S	70.48	71.99	2.14	12.34	88.97	0.67	-36.67
49S	67.43	73.00	8.27	6.92	85.27	0.53	-32.70
50S	60.08	75.18	25.13	12.77	75.90	0.69	-12.63
51U	67.19	72.37	7.71	10.35	86.06	0.68	-31.19
52S	61.34	66.92	9.09	9.85	86.14	0.68	-9.23
53R	88.96	82.64	-7.11	6.42	98.76	0.58	-33.87
54U	66.70	67.72	1.53	8.84	88.15	0.72	-19.60
55U	61.61	72.11	17.05	16.59	80.81	0.55	-27.91
56S	80.34	74.19	-7.65	14.02	94.91	0.62	-46.14

Table 2. Some statistical evaluations of the simulated ensemble with measured data for NO₂: MP, MO – mean simulated and observed concentrations, NMB – normalised mean bias, NRMSE – normalised root mean square error, FA2 - % of cases within FA2 margins, PCC – correlation coefficient, NMSD – normalised mean square deviation

Station	MP µg/m ³	MO µg/m ³	NMB %	NRMSE %	FA2 %	PCC	NMSD %
12U	15.47	7.11	-54.04	7.52	50.84	0.52	-57.49
13S	16.87	8.23	-51.22	5.07	53.82	0.38	-64.49
41U	25.32	11.10	-56.15	9.47	43.67	0.35	-68.54
43U	12.83	5.85	-54.45	9.63	49.29	0.51	-60.45
44S	9.98	5.99	-39.96	8.73	62.17	0.63	-38.77
45S	13.85	6.04	-56.35	9.25	49.21	0.46	-71.51
49S	22.66	9.51	-58.02	15.03	43.58	0.42	-56.48
50S	23.45	10.14	-56.76	9.56	43.20	0.47	-54.84
51U	18.55	7.48	-59.68	9.09	46.62	0.47	-74.09
52S	27.28	16.91	-38.01	7.57	64.52	0.67	-42.91
53R	3.83	2.71	-29.22	10.69	75.52	0.71	-39.38
54U	42.07	21.44	-49.04	10.07	52.10	0.65	-44.92
55U	14.01	5.12	-63.42	7.15	42.76	0.46	-78.92
56S	7.59	4.10	-45.91	7.84	56.96	0.61	-50.69

Criteria of acceptance of the simulated/measured concentrations agreement are defined in Thunis et al. (2013a, b). The comparison of the results in Tables 1, 2 with these criteria, shows that for most of the stations the criteria are fulfilled. The NO₂ simulations, in particular evaluated by the FA2 criterion, perform worse. This can be explained partially by the great uncertainty in the NO₂ emission inventory – the NO₂ emissions from road transport are given as total for the country and their spatial distribution is determined by surrogates – the road categories and network density.

The other probable reason is that the stations of the Bulgarian National Network for Air Quality Control are mostly located in the cities and near big industrial sources in order to reflect the highest pollution levels. The simulation horizontal spatial resolution (3 km) is probably not good enough to “catch” these NO₂ maxima. The ozone fields, from the other hand, are smoother, with smaller horizontal gradients and maxima not so closely related to the sources.

The comparison of the simulated fields with data of the pollution levels shows an agreement, which is not brilliant. The acceptance criteria, defined in Thunis et al. (2013a, b) are, however, fulfilled to a great extend. This means that the agreement is reasonable enough, so that the simulated ensemble can be treated as representative reliable for the atmospheric composition climate of Bulgaria.

4. Some examples, comments and discussion

The most simple atmospheric composition evaluations are, of course, the surface concentrations. By averaging over the 8-year simulated fields ensemble the mean annual and seasonal surface concentrations can be obtained and treated as respective “typical” daily concentration patterns.

Plots of some of these “typical” annual surface concentrations are shown in Fig. 2 for some of the most popular compounds – NO₂, SO₂, ozone. What can be seen from the plots is not surprising: the big cities and the road network are clearly outlined in the NO₂ surface concentrations, the big power plants in the SO₂ surface concentrations.

The ozone fields are much more complex. What should be mentioned is the expected effect of ozone minimums over big cities. The road network can also be followed in the plots as lines with lower ozone concentrations. This is in a good agreement with the ozone chemistry scheme.

The seasonal and diurnal variations of the averaged for the country surface O₃ and NO₂ are shown in Fig. 3, together with the mean, maximal and minimal values there are also the curves denoted by 0.25, 0.75, 0.1 and 0.9. These curves show the imaginary concentrations for which the probability of the simulated ones to be smaller is respectively 0.25, 0.75, 0.1 and 0.9. Thus the band 0.25-0.75 contains 50% and the band 0.1-0.9 - 80% of the possible cases. The plots are self explanatory enough and demonstrate the seasonal and diurnal O₃ and NO₂ variations.

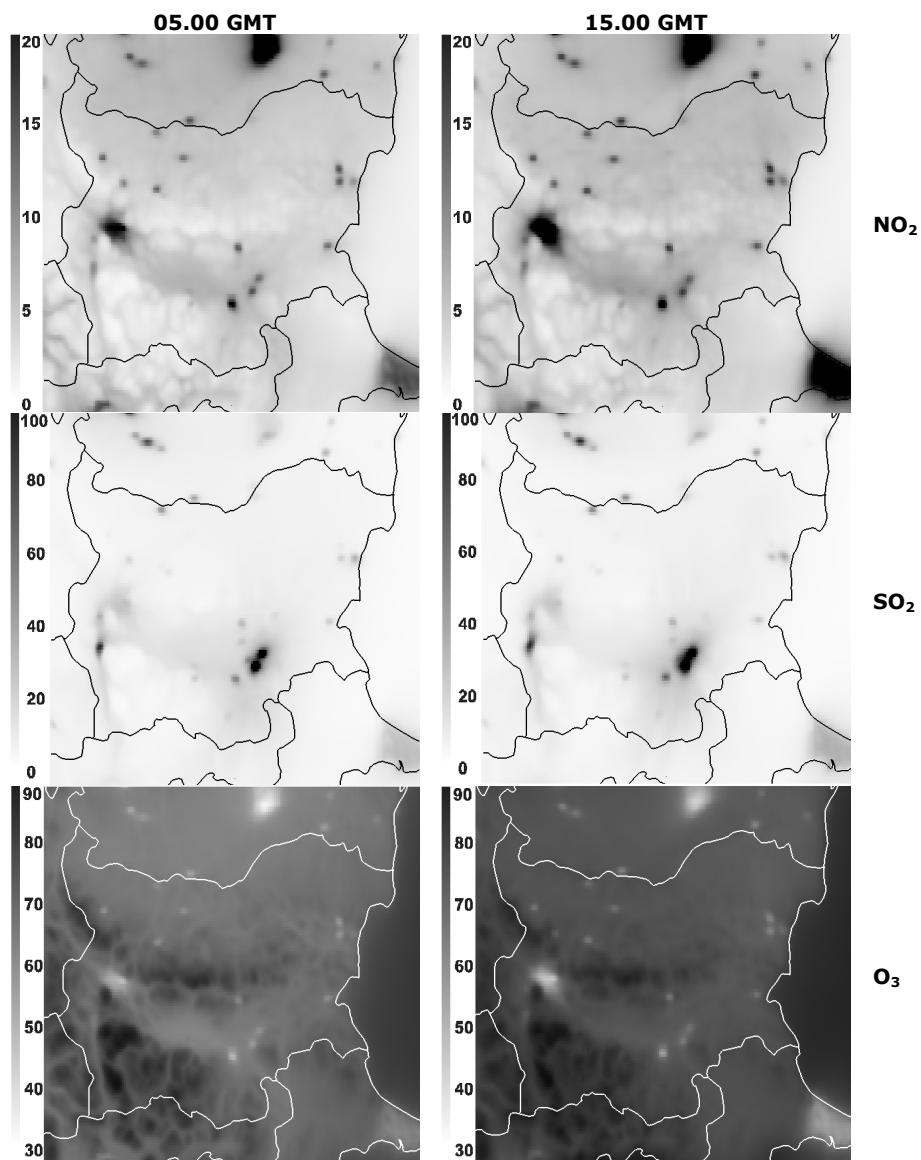


Figure 2. Surface concentrations of NO_2 , SO_2 and O_3 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] averaged annually at 05.00 and 17.00 GMT

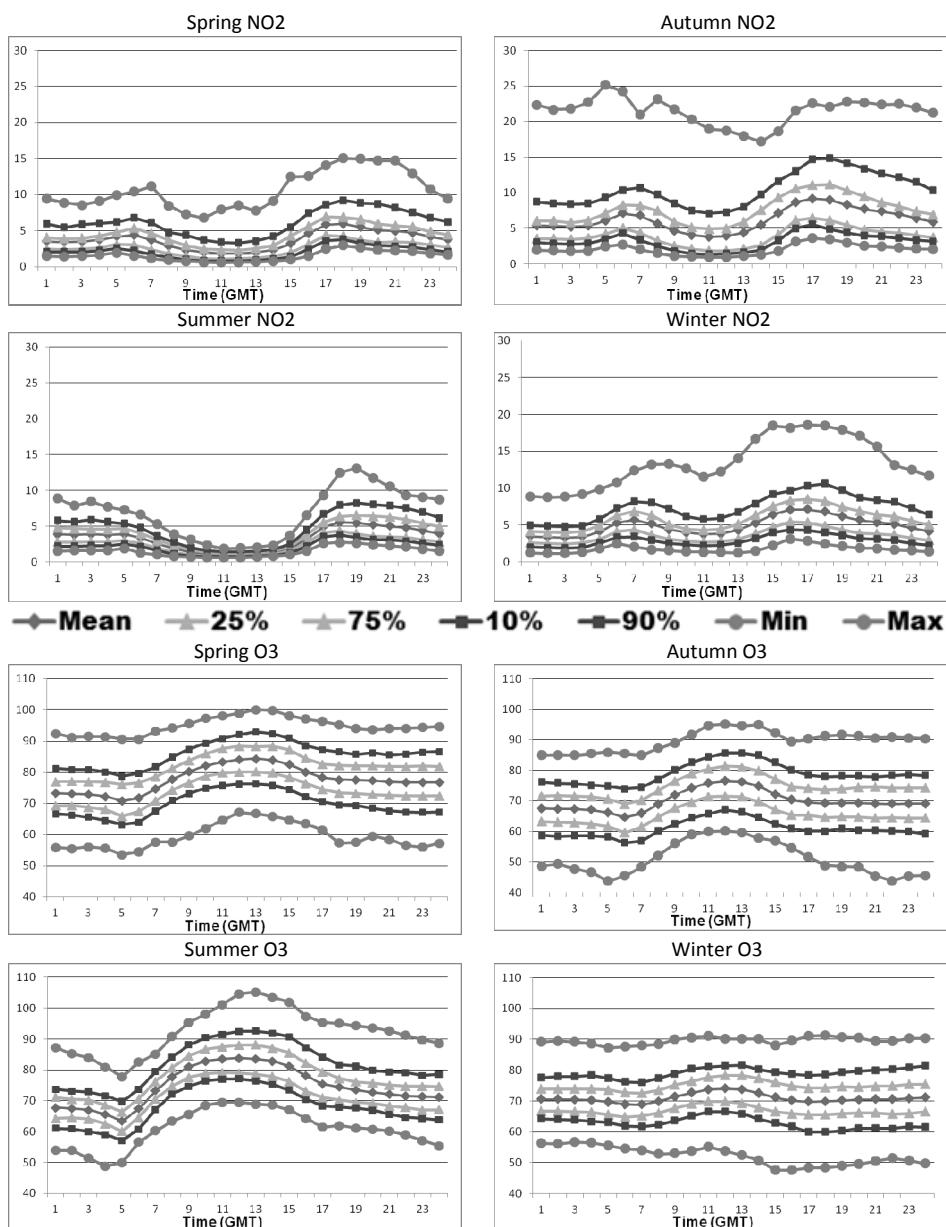


Figure 3 Seasonal variations of the O₃ and NO₂ surface concentrations [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], averaged for the territory of Bulgaria: curves of mean, maximal and minimal values as well as curves show the imaginary concentrations for which the probability of the simulated ones to be smaller is respectively 0.25, 0.75, 0.1 and 0.9.

The local effects on the ensemble behaviour are demonstrated in Fig. 4, where the same characteristics are calculated for Bulgaria, Rojen (mountain site) and the cities of Sofia and Stara Zagora (smaller city). As it can be seen, the local effects are also very well displayed, in particular in the NO₂ fields, which for the different places simply can not be plotted with the same scale. The geographical variations in the O₃ behaviour are much smaller.

An important characteristic of the atmospheric composition climate of the country is the contribution of the emission of different categories to the overall atmospheric composition pattern. The relative contributions were calculated day by day and then, by averaging over the 8-year ensemble the “typical” contributions for the four seasons and annually were obtained. Some illustrations of the emission impact evaluations will be given in the present paper.

In order to demonstrate the emission contribution behaviour in a more simple and easy to comprehend way, the relative contribution fields can be averaged over some domain (in this case the territory of Bulgaria), which makes it possible to jointly follow and compare the diurnal behaviour of the respective contributions for different species. Such plots for some of the compounds are given in Fig. 5.

There is no need to describe the plots in details, but some comments on them could be made. First of all it could be seen that the different emissions relative contribution to the concentration of different species could be rather different. The contributions of different emission categories to different species surface concentrations have different diurnal course and different importance. The energy production is the major contributor to SO₂ and PM2.5 concentrations, while the biogenic emissions have near zero or even negative contributions. The major contributors to the NO₂ concentrations are the road transport and biogenic emissions. Their diurnal courses are in counter-phase, which can be easily explained by the ozone photochemistry cycle.

One can not help but notice the small contribution of biogenic emissions to surface ozone. This fact was extensively discussed in Gadzhev (2012, 2013a) and was explained by the fact that for Bulgaria the local O₃ production rate is limited by the availability of NO_x, a regime which is called NO_x - limited. The contribution of the emission from categories 1 and 7, which are the major sources of the other ozone precursor – nitrogen oxides, is also small. This is an indirect indicator, that the surface ozone in Bulgaria is to a small extend due to domestic sources, but is mostly imported.

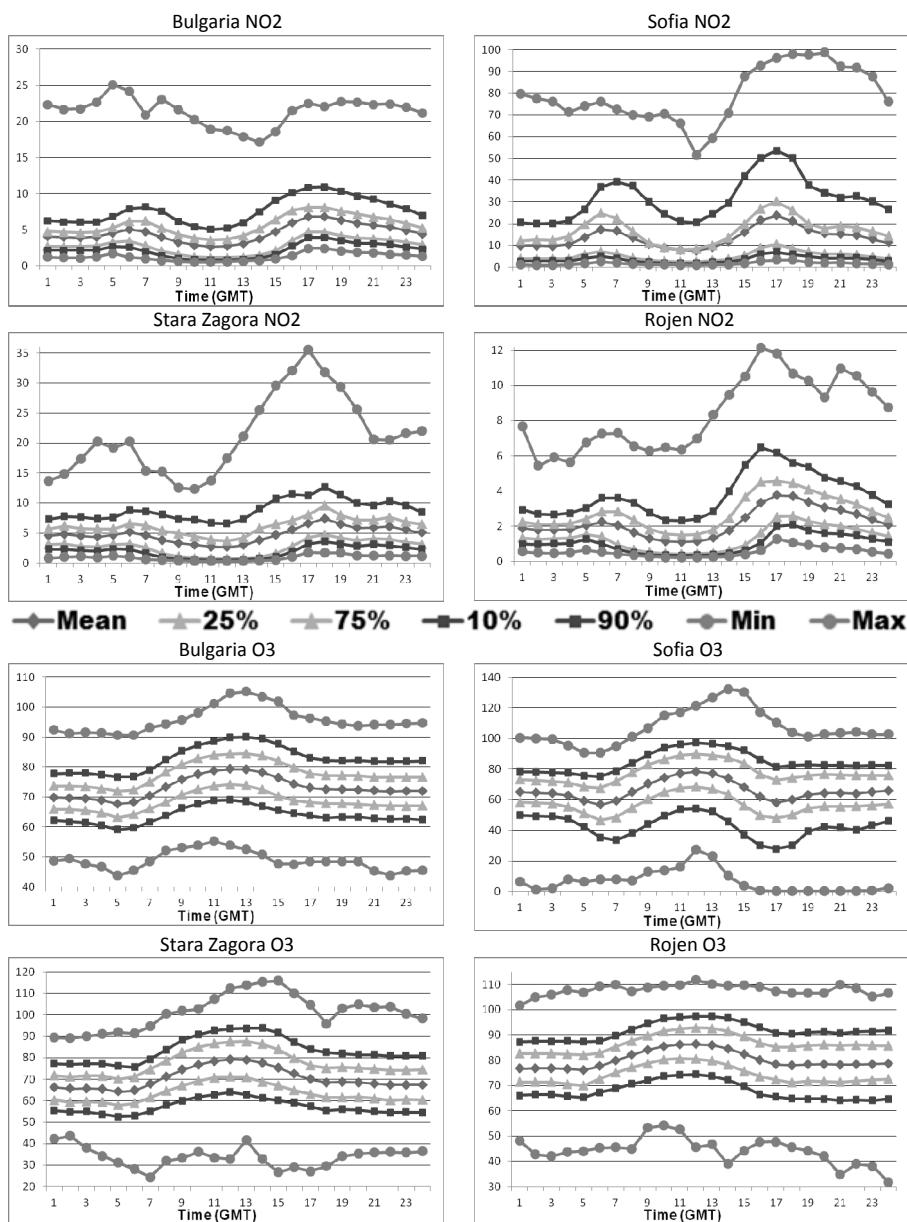


Figure 4 Geographical variations of the annual mean O_3 and NO_2 surface concentrations [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] - averaged for the territory of Bulgaria and for Rojen, Sofia and Stara Zagora: curves of mean, maximal and minimal values as well as curves show the imaginary concentrations for which the probability of the simulated ones to be smaller is respectively 0.25, 0.75, 0.1 and 0.9.

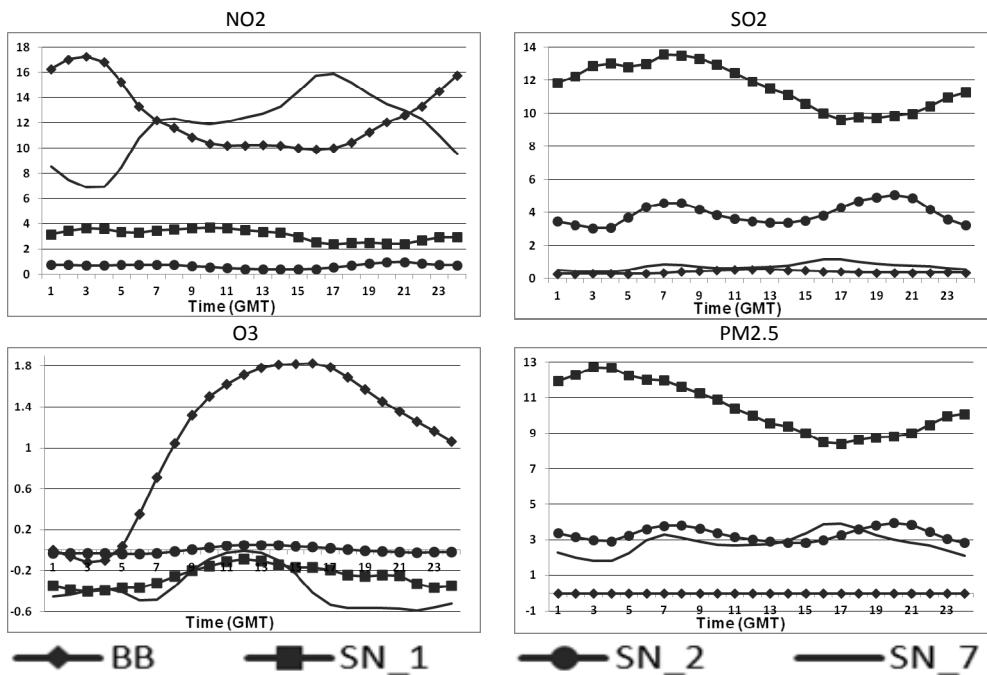


Figure 5 Plots of the “typical” annual diurnal course of the averaged for the territory of Bulgaria relative contributions [%] of emissions from categories 1 (SN_1), 2 (SN_2) and 7 (SN_7) and of the biogenic emissions (BB) to the concentrations of NO₂, SO₂, O₃ and PM2.5.

The picture is completely different for the city of Sofia (Fig.6). The NO₂ concentrations are totally dominated by road transport emissions. The none-industrial combustion has big contribution in SO₂ formation (probably mostly from the city heating plants and domestic heating). The NO₂ also has dominating (negative) contribution to the surface ozone. It is particularly large in morning and late afternoon, when the city traffic is most intensive. In the afternoon the contribution of road transport to the PM2.5 levels becomes even bigger than the contribution of the energy production emissions.

The different emission categories contributions for a typically mountain location (Rojen) are also given in Fig. 6. It can be seen that the behavior of the different emission categories is different compared to the urban location of Sofia. For example, the large contribution of biogenic emissions and the positive contribution of emissions from road transport around noon can be mentioned.

Another very important atmospheric composition characteristic is the contribution of different processes to the regional pollution over Bulgaria.

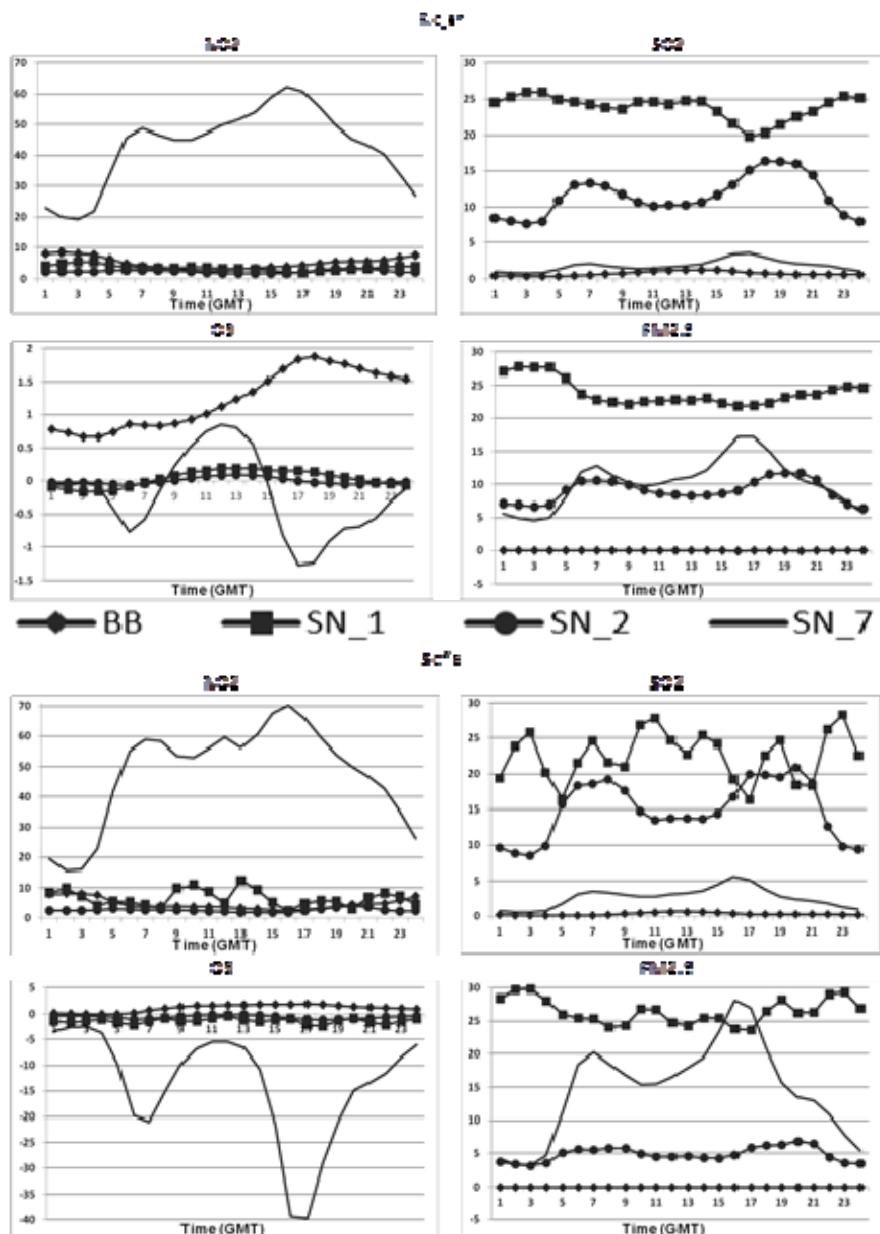


Figure 6. Plots of the “typical” annual diurnal course of relative contributions [%] of emissions from categories 1 (SN_1), 2 (SN_2) and 7 (SN_7) and of the biogenic emissions (BB) to the concentrations of NO₂, SO₂, O₃ and PM2.5 for Sofia and Rojen.

An example of the annually averaged special distribution of the processes contribution to the surface ozone is given in Fig. 7. It can be seen that the chemical processes have mostly negative impact. In particular the big cities and the road network (powerful nitrogen oxide sources) can be clearly followed as ozone sinks.

The vertical diffusion impact is mostly positive (turbulent transport of ozone from the upper layers). The effect is very prominent in the big cities, where the very large nitrogen oxide surface sources cause big ozone deficiency (big negative vertical gradients) and so the turbulent transport is more intensive. Some small spots of vertical diffusion negative impact can be seen at the location of big power plants. This is probably due to the fact that these are high sources of nitrogen oxide, which cause ozone deficiency aloft, so the ozone vertical gradients near surface are positive.

The horizontal and vertical advection contributions pattern is very complex and clearly reflects landscape induced local circulation systems. The horizontal and vertical advection contributions have mostly opposite signs, which is a direct and apparent consequence of the atmosphere continuity equation.

The horizontal diffusion, as it should, acts for compensating the ozone deficiency and so is generally in counter-phase with the chemical processes.

The averaged over the territory of Bulgaria contributions of some of the processes to the surface ozone concentrations will be also demonstrated (Fig. 8).

Very briefly the main characteristics, which can be seen from the plots, are the following:

- (1) There are well manifested seasonal differences and diurnal variations;
- (2) The ozone concentration change is formed as a rather small sum of processes with larger values and different signs;
- (3) Averaged for the territory of Bulgaria the impacts of horizontal diffusion and cloud processes/aqueous chemistry are negligible;
- (4) For all the seasons, except winter, and annually the vertical diffusion has a large positive impact, especially during the day (more intensive turbulence) – ozone transport from higher atmosphere to ground level;
- (5) The dry deposition has negative impact, but it is almost negligible during winter and significant for spring, summer (in particular) and autumn during daytime. This is easy to explain – the dry deposition is proportional to surface concentration, and so is large when the surface concentrations are large;
- (6) For all the seasons, except summer and especially in winter, and annually the horizontal advection has large positive impact. In summer around noon there is a period of horizontal advection negative impact. All this means that for most of the time there is ozone inflow through the country boundary;
- (7) The impact of chemical processes is always negative, except during daytime in the summer

The last three characteristic features of the processes behavior are sound evidence that the ozone/ozone precursors in Bulgaria are mostly of foreign origin.

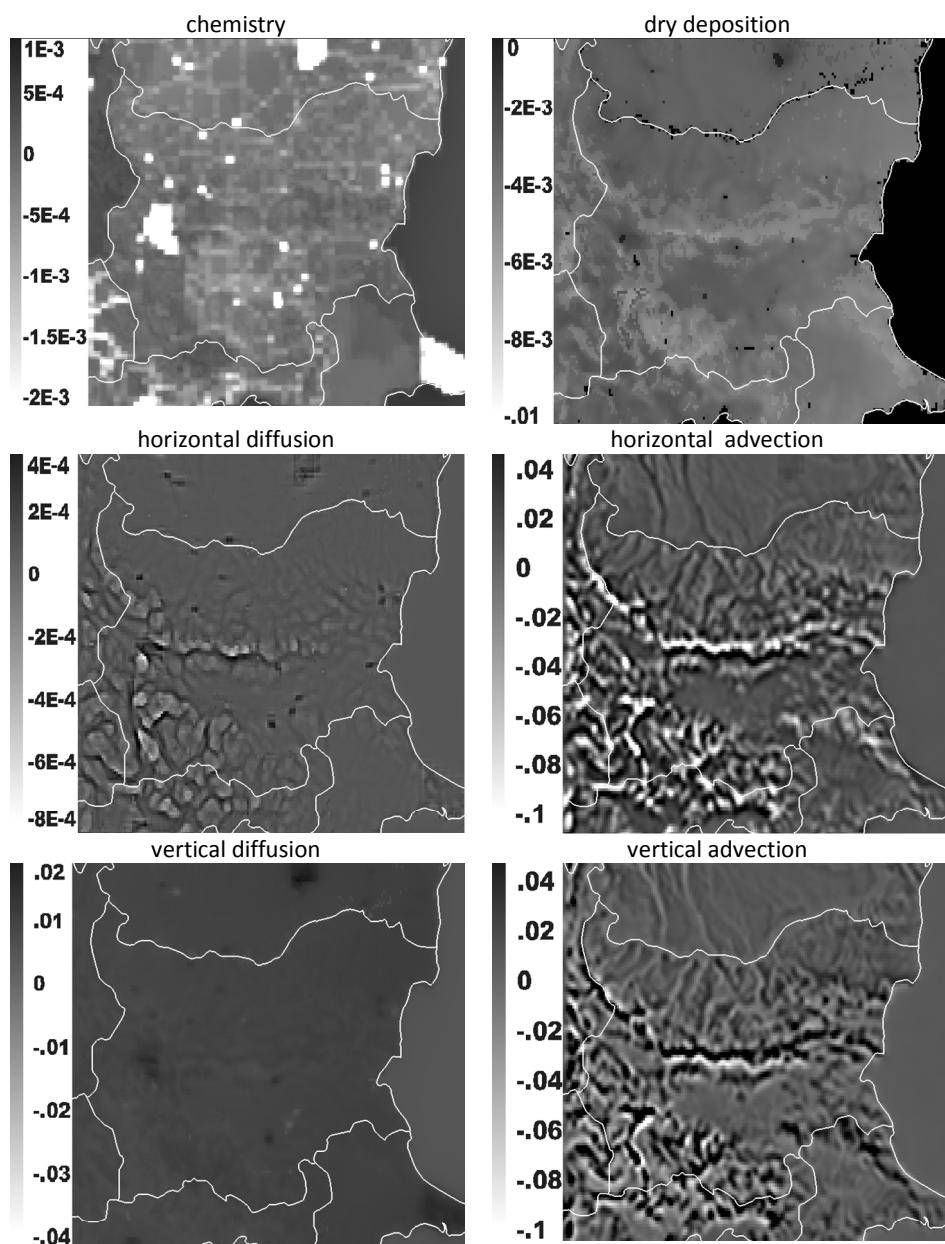


Figure 7 Horizontal distribution of the contributions [$\mu\text{g}/\text{hour}$] of different processes to the hourly surface ozone changes at 06.00GMT (08.00 local time).

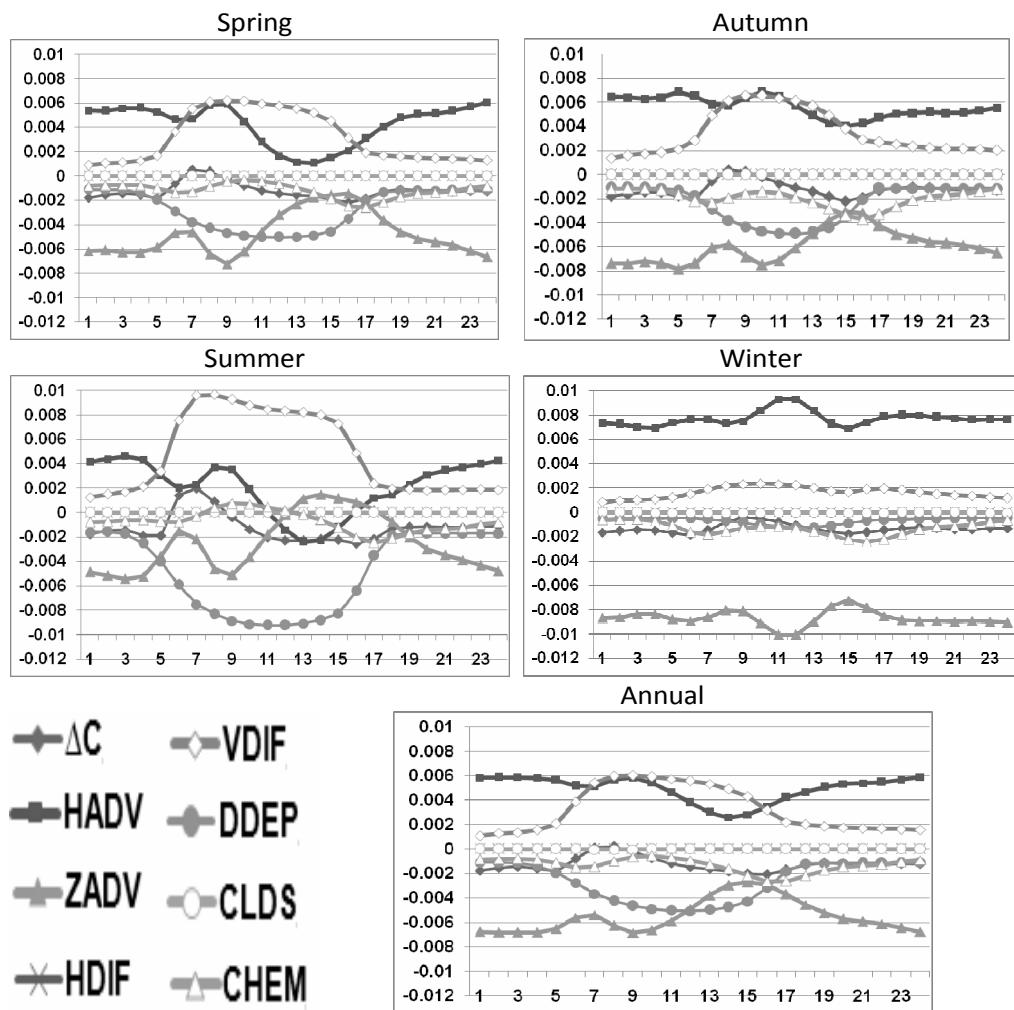


Figure 8 Plots of the “typical” annual and seasonal diurnal course of the averaged for the territory of Bulgaria contributions of vertical advection (ZADV), vertical diffusion (VDIF), horizontal diffusion (HDIF), dry deposition (DDEP), chemistry (CHEM), horizontal advection (HADV), cloud processes/aqueous chemistry (CLDS) to the hourly changes (Δc) of surface O₃.

In order the local heterogeneities of the different processes behavior to be demonstrated the annually averaged process contributions to SO₂ surface concentration changes for 4 different points in Bulgaria, together with the averaged for the country are shown in Fig. 9. It can be seen that the processes temporal behavior and interaction is different for the different points. It is remarkable how fast

and chaotic the changes of the horizontal and vertical advection are for Sofia and Burgas. The horizontal and vertical advection contributions have mostly opposite signs, which effect had already been mentioned above. The diurnal course of horizontal and vertical advection contributions for Rojen is a very typical and good example of the role of mountain circulation.

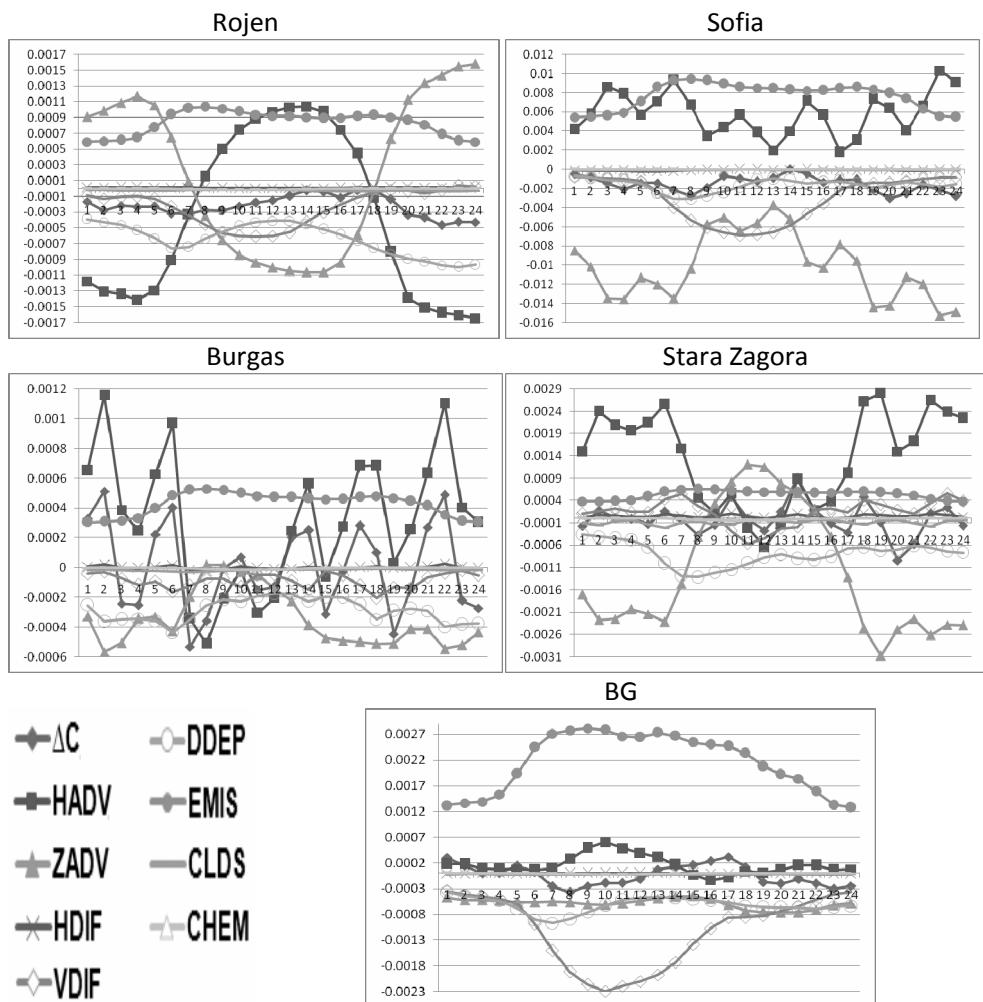


Figure 9. Plots of the “typical” annual diurnal course of the in some points and averaged for the territory of Bulgaria contributions of vertical advection (ZADV), vertical diffusion (VDIF), emissions (EMIS), dry deposition (DDEP), chemistry (CHEM), horizontal advection (HADV), horizontal diffusion (HDIF), cloud processes/aqueous chemistry (CLDS) to the hourly changes (Δc) of surface SO_2 .

5. Conclusions

The numerical experiments performed produced a huge volume of information, which have to be carefully analyzed and generalized so that some final conclusions could be made. Nevertheless, some of the major findings so far will be listed below:

- the behavior of the surface concentrations, averaged over the ensemble annually, or for the four seasons and over the territory of the country is reasonable and demonstrates effects which for most of the compounds can be explained from a point of view of the generally accepted schemes of dynamic influences (in particular the role of turbulent transport and its dependence on atmospheric stability) and/or chemical transformations;

- the SN_1 contribution to the surface SO₂ concentrations is smaller than one should expect, having in mind that the "Maritza" power plants are among the biggest sulfur sources in Europe. Probably, a significant amount of SO₂ from these sources becomes a subject of larger scale transport and so is moved outside the country;

- the contribution of biogenic emissions to surface ozone in the country is relatively small. This indicates that local O₃ production rate is limited by the availability of NO_x concentration, a regime which is called NO_x-limited. Obviously from a point of view of atmospheric composition climate the Balkan Peninsula and Bulgaria are predominantly "rural" environment which explains the ozone photochemistry specifics in the region.;

- the contribution of the emission from categories 1 and 7, which are the major sources of the other ozone precursor – nitrogen oxides, is also small. This, once again is an indirect indicator, that the surface ozone in Bulgaria is to a small extend due to domestic sources, but is mostly imported;

- the results produced by the CMAQ "Integrated Process Rate Analysis" demonstrate the very complex behavior and interaction of the different processes. The analysis of the behavior of different processes does not give simple answer of the question how the air pollution in a given point or region is formed.

Acknowledgements

The present work is supported by the EC-FP7 grants 261323 (project EGI-InSPIRE) and PIRSES-GA-2013-612671 (project REQUA).

Deep gratitude is due to US EPA, US NCEP and EMEP for providing free-of-charge data and software. Special thanks to the Netherlands Organization for Applied Scientific research (TNO) for providing us with the high-resolution European anthropogenic emission inventory.

References

- ATANASSOV E., T. GUROV & A. KARAIANOVA (2006): Computational Grid: structure and Applications, *Journal Avtomatica i Informatica* (in Bulgarian), year XL, September 2006, 40-43.
- BYUN, D., J. YOUNG., G. GIPSON, J. GODOWITCH, F.S. BINKOWSKI, S. ROSELLE, B. BENJEY, J. PLEIM, J. CHING, J. NOVAK, C. COATS, T. ODMAN, A. HANNA, K. ALAPATY, R. MATHUR, J. MCHENRY, U. SHANKAR, S. FINE, A. XIU & C. JANG (1998) Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, *10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona*, 264-268.
- BYUN D. & J. CHING (1999) Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. *EPA Report 600/R-99/030, Washington DC*. <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- CEP (2003) Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina.
- DUDHIA J. (1993) A non-hydrostatic version of the Penn State/NCAR Mesoscale Model: validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. *Mon. Wea. Rev.* 121, 1493-1513.
- DUDHIA J. (1996) A multi-layer soil temperature model for MM5, *Preprint from the Sixth PSU/NCAR Mesoscale Model Users' Workshop*
- DUDHIA J., D. GILL, K. MANNING, WEI WANG, & G. BRUYERE (2005) *PSU/NCAR mesoscale Modeling System, Tutorial Class Notes and User's Guide: MM5 Modeling System Version 3*, http://www.mmm.ucar.edu/mm5/documents/MM5_tut_Web_notes/tutorialTOC.htm
- European Parliament (2002) DIRECTIVE 2002/3/EC of 12 February 2002 relating to ozone in ambient air, *Official Journal of the European Communities* (9.3.2002), L67, 14-30.
- FOSTER J. & C. KESSELMANN (1998) *The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure*, Morgan Kaufmann.
- GADZHEV G., G. JORDANOV, K. GANEV, M. PRODANOVA, D. SYRAKOV & N. MILOSHEV (2011) Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region, *Lecture Notes in Computer Sciences, Dimov, I. S. Dimova, and N. Kolkovska (Eds.): LNCS 6046*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 150-157.
- GADZHEV G., K. GANEV, D., SYRAKOV, N., MILOSHEV & M., PRODANOVA (2012) Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria, *Int. J. Environment and Pollution*, 50, 1/2/3/4, 130-139.
- GADZHEV G., K. GANEV, N., MILOSHEV, D., SYRAKOV & M., PRODANOVA (2013a) Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, *Computers and Mathematics with Applications* 65, 402-422.

- GADZHEV G., K. GANEV, D., SYRAKOV, M. PRODANOVA & N., MILOSHEV (2013b) Some Statistical Evaluations of Numerically Obtained Atmospheric Composition Fields in Bulgaria, *Proceedings of 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric. Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. 6-9 May 2013, Madrid, Spain*, 373-377.
- GADZHEV G., K. GANEV, N. MILOSHEV, D. SYRAKOV, & M. PRODANOVA (2014a) Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria – Grid Computing Simulations, in I. Lirkov et al. (Eds.): *LSSC 2013, LNCS 8353*, 484–490
- GADZHEV G., K. GANEV, N. MILOSHEV, D. SYRAKOV, & M. PRODANOVA (2014b) Analysis of the Processes Which Form the Air Pollution Pattern over Bulgaria, in I. Lirkov et al. (Eds.): *LSSC 2013, LNCS 8353*, 390–396
- GADZHEV G., K. GANEV & N. MILOSHEV (2014c) Numerical study of the atmospheric composition climate of Bulgaria – validation of the computer simulation results, *Proc. of the 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 8-11 September 2014, Varna, Bulgaria*, 41-45,
- GRELL, G.A., J. DUDHIA & D.R. STAUFFER (1994) A description of the Fifth Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5). *NCAR Technical Note, NCAR TN-398-STR*, pp. 138
- THUNIS P., D. PERNIGOTTI & M. GERBOLES (2013a) Model quality objectives based on measurement uncertainty. Part I: Ozone. *Atmospheric Environment* 79, 861-868
- THUNIS P., D. PERNIGOTTI & M. GERBOLES (2013b) Model quality objectives based on measurement uncertainty. Part II: NO₂ and PM10. *Atmospheric Environment* 79, 869-878
- VISSCHEDIJK A. J. H., P.Y.J. ZANDVELD & H.A.C. DENIER VAN DER GON (2007) A High Resolution Gridded European Emission Database for the EU Integrate Project GEMS, *TNO-report 2007-A-R0233/B*, Apeldoorn, The Netherlands.

Numerical study of the air quality in the city of Sofia – some preliminary results

Ivelina Georgieva*, Georgi Gadzhev and Kostadin Ganev

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography,
Bulgarian Academy of Sciences,
Acad. G. Boncev str. bl. 3, Sofia 1113, Bulgaria
Email: iivanova@geophys.bas.bg
Email: ggadjev@geophys.bas.bg
Email: kganев@geophys.bas.bg

*Corresponding author

Maria Prodanova and Dimiter Syrakov

National Institute of Meteorology and Hydrology,
Bulgarian Academy of Sciences,
66 Tzarigradsko Chausee, Sofia 1784, Bulgaria
Email: maria.prodanova@meteo.bg
Email: Dimiter.Syrakov@meteo.bg

Nikolay Miloshev

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography,
Bulgarian Academy of Sciences,
Acad. G. Boncev str. bl. 3, Sofia 1113, Bulgaria
Email: miloshev@geophys.bas.bg

Abstract: Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in the city of Sofia have been recently performed. The simulations were carried out using the following set of models: the model WRF used as meteorological pre-processor; CMAQ – the community multiscale air quality system – the chemical transport model; SMOKE – the sparse matrix operator kernel emissions modelling system – the emission model. As the NCEP global analysis data with one degree resolution was used as meteorological background, the WRF and CMAQ nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 1 km resolution over Sofia. The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions were taken from the TNO inventory. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE. Different characteristics of the numerically obtained concentration fields, including air quality indices will be demonstrated in the present paper.

Keywords: numerical modelling; ensemble of numerical simulation results; air quality indices; AQI; urban scale atmospheric composition.



26995

Numerical Study of the Air Quality in the City of Sofia

I. Georgieva* (NIGGG-BAS), G. Gadzhev (NIGGG-BAS), K. Ganev (NIGGG-BAS), M. Prodanova (NIMH-BAS), D. Syrakov (NIMH-BAS) & N. Miloshev (NIGGG-BAS)

SUMMARY

Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in the city of Sofia have been recently performed. The simulations were carried out using the following set of models: the model WRF used as meteorological pre-processor; CMAQ - the Community Multiscale Air Quality System – the chemical transport model; SMOKE - the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System – the emission model. As the NCEP Global Analysis Data with 1 degree resolution was used as meteorological background, the WRF and CMAQ nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 1 km resolution over Sofia. The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions were taken from the TNO inventory. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE. Different characteristics of the numerically obtained concentration fields will be demonstrated in the present paper.

Introduction

Recently extensive studies for long enough simulation periods and good resolution of the atmospheric composition status in Bulgaria have been carried out using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data (Gadzhev et al. 2011 a,b, 2012, 2013 a,b,c,d).

The next step in studying the atmospheric composition climate is performing simulations in urban scale. The simulations aim at constructing of ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of the city of Sofia – typical and extreme features of the special/temporal behaviour, annual means and seasonal variations, etc.

Some preliminary results from the computer simulations will be presented in the present paper.

Modelling Tools and Input Data

The simulations are carried out with the following set of models:

- WRF (Shamarock et al. 2007) used as meteorological pre-processor;
- CMAQ - the Community Multiscale Air Quality System (Byun *et al.*, 1998, Byun and Ching, 1999), being the Chemical Transport Model (CTM) of the system, and
- SMOKE - the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System (CEP, 2003) – the emission pre-processor of Models-3 system.

The large scale (background) meteorological data used in the present study is the NCEP Global Analysis Data with $1^\circ \times 1^\circ$ resolution. WRF and CMAQ nesting capabilities are applied for downscaling the simulations to a 1 km step for the innermost domain (Sofia).

The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions were taken from the TNO inventory (A. Visschedijk *et al.*, 2007). Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE. A detailed description of the emission modelling is given in Gadzhev *et al.* (2013a).

Results, Comments and Discussion

The most simple and natural atmospheric composition evaluations are, of course, the surface concentrations. By averaging over the whole simulated fields ensemble the mean annual and seasonal surface concentrations can be obtained and treated as respective “typical” daily concentration patterns. Plots of some of these “typical” annual, summer and winter NO₂ and O₃ surface concentrations are shown in Figures 1, 2. The spatial, seasonal and diurnal variations in NO₂ and O₃ surface concentration fields are very well manifested.

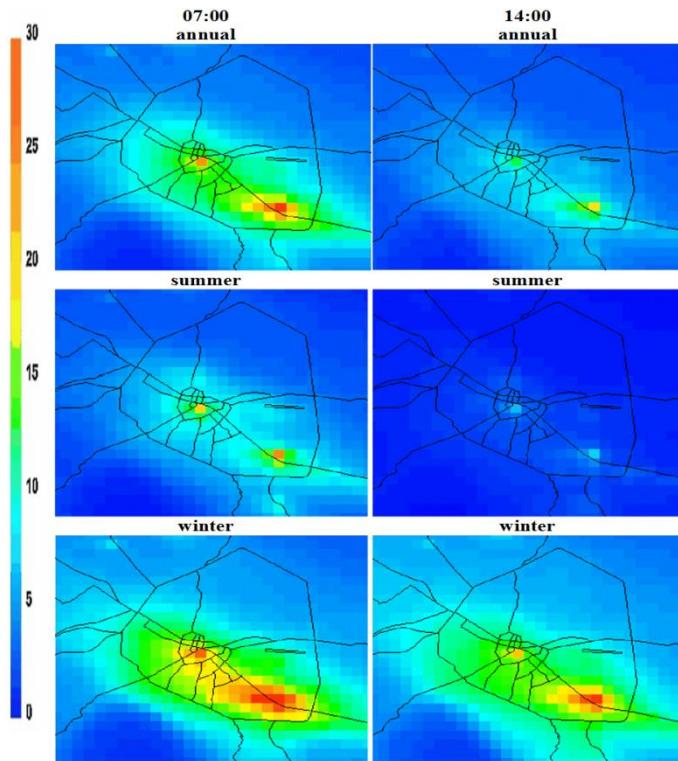


Figure 1 Surface NO₂ "typical" annual, summer and winter concentrations [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] at 07:00 and 14:00 GMT.

As it should be expected, because the major NO₂ source in the city is the road transport (surface sources) the surface NO₂ concentrations are higher early in the morning and much smaller at noon, when the atmosphere is usually unstable, and so the turbulence transports the NO₂ aloft more intensively. For the same reasons the concentrations during the winter period are bigger than those in summer, or the annually averaged. The spatial distribution is significantly heterogeneous – the maximal concentrations are formed in the city centre and along the boulevard with most busy traffic.

The behaviour of the surface ozone is more complex. As shown in Gadzhev *et al.* (2012, 2013 a,b,c,d) the ozone in Bulgaria is to a great extend due to transport from abroad. This is one of the circumstances, because of which the ozone concentrations early in the morning are smaller than at noon (less intensive transport from higher levels). The other is, of course, the ozone photochemistry, which explains both the higher O₃ concentrations at daytime and during the summer and the O₃ gaps in the regions, where the NO₂ concentrations are large.

As already stated, the simulated fields ensemble is large enough to allow statistical treatment. In particular the probability density functions for each of the atmospheric compounds can be calculated, with the respective seasonal and diurnal variations, for each of the points of the simulation grid or averaged over the territory of the city. Knowing the probability density functions means to know everything about the ensemble.

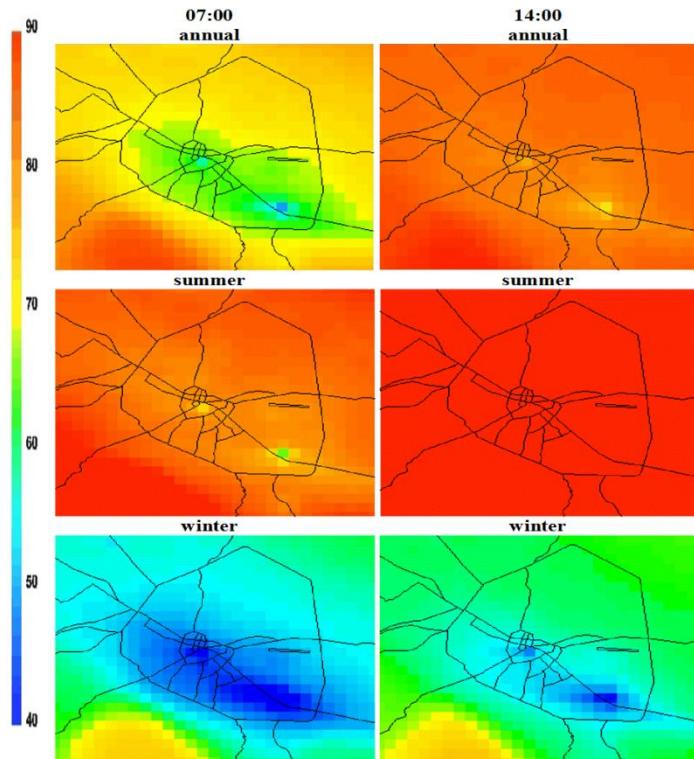


Figure 2 Surface O_3 "typical" annual, summer and winter concentrations [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] at 07:00 and 14:00 GMT.

Conclusions

The demonstrations, presented in the present paper are just a first glance on the atmospheric composition status of the city of Sofia. What can be seen so far is that the results does not defy the common sense and does not oppose the schematic concepts about how the air pollution near earth surface is formed. The numerical experiments are still going on, but when accomplished they will produce a huge volume of information, which have to be carefully analyzed and generalized so that some final conclusions can be made. It is planned computer simulations to be made for different emission scenarios, so that the contribution of different source categories to the atmospheric composition climate of Sofia can be evaluated.

The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal behaviour could be interesting. Therefore the CMAQ "Integrated Process Rate Analysis" option was applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation in the city of Sofia. These results have still to be generalised and carefully analysed.

Acknowledgments

The present work is supported by the Bulgarian National Science Fund (grant ДЦВП-02/1/29.12.2009), the Bulgarian Ministry of Education and Science (grant Д01-206/21.07.2014) and the EC-FP7 grant 261323 (project EGI-InSPIRE). Deep gratitude is due to US EPA, US NCEP and EMEP for providing free-of-charge data and software. Special thanks to the Netherlands Organization for Applied Scientific research (TNO) for providing us with the high-resolution European anthropogenic emission inventory.



References

- [1] Byun, D., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F.S. Binkowski, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, C. Jang, 1998: Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, Phoenix, Arizona, 264-268.
- [2] Byun, D., J. Ching, 1999: Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. EPA Report 600/R-99/030, Washington DC. <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- [3] CEP Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina 2003.
- [4] Gadzhev, G., D. Syrakov, K. Ganev, A. Brandiyska, N. Miloshev, G. Georgiev, M. Prodanova, 2011a: Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria. Study of the Contribution of Biogenic Emissions, AIP Conf. Proc. 1404, 200, 200-209; doi: 10.1063/1.3659921
- [5] Gadzhev, G., G. Jordanov, K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev, 2011b: Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region, Lecture Notes in Computer Sciences, Dimov, I. S. Dimova, and N. Kolkovska (Eds.): LNCS 6046, c. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 150-157.
- [6] Gadzhev, G., K. Ganev, D. Syrakov, N. Miloshev, M. Prodanova, 2012: Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 50, Nos. 1/2/3/4, 2012, 130-139.
- [7] Gadzhev, G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, M. Prodanova, 2013a: Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, Computers and Mathematics with Applications 65, 402-422.
- [8] Gadzhev, G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, M. Prodanova, 2013b: Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria – Grid Computing Simulations, 9th International Conference, LSSC, 2013, Sozopol, Bulgaria, 484-490.
- [9] Gadzhev, G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, M. Prodanova, 2013c: Analysis of the Processes which Form the Air Pollution Pattern Over Bulgaria, 9th International Conference, LSSC, 2013, Sozopol, Bulgaria, 390-396 .
- [10] Gadzhev, G., K. Ganev, D. Syrakov, M. Prodanova, N. Miloshev, 2013d: Some Statistical Evaluations of Numerically Obtained Atmospheric Composition Fields in Bulgaria, Proceedings of 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Madrid, Spain.
- [11] Shamarock et al., 2007: A description of the Advanced Research WRF Version 2. http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf Accessed 15 June 2010.
- [12] Visschedijk, A., Zandveld P., van der Gon, H., 2007: A high resolution gridded European emission database for the EU integrated project GEMS, TNO report 2007-A-R0233/B, The Netherlands.

**16th International Conference on
Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
8-11 September 2014, Varna, Bulgaria**

**NUMERICAL STUDY OF THE AIR QUALITY IN THE CITY OF SOFIA – SOME
PRELIMINARY RESULTS**

*Ivelina Georgieva¹, Georgi Gadzhev¹, Kostadin Ganev¹, Maria Prodanova², Dimitar Syrakov² and
Nikolay Miloshev¹*

¹National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia,
Bulgaria

²National Institute of Meteorology and Hydrology, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria²

Abstract: Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in the city of Sofia have been recently performed. The simulations were carried out using the following set of models: the model WRF used as meteorological pre-processor; CMAQ - the Community Multiscale Air Quality System – the chemical transport model; SMOKE - the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System – the emission model. As the NCEP Global Analysis Data with 1 degree resolution was used as meteorological background, the WRF and CMAQ nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 1 km resolution over Sofia. The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions were taken from the TNO inventory. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE. Different characteristics of the numerically obtained concentration fields will be demonstrated in the present paper.

Key words: urban scale atmospheric composition numerical modelling, ensemble of numerical simulation results

INTRODUCTION

Recently extensive studies for long enough simulation periods and good resolution of the atmospheric composition status in Bulgaria have been carried out using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data (Gadzhev et al. 2011 a,b, 2012, 2013 a,b,c,d).

The next step in studying the atmospheric composition climate is performing simulations in urban scale. The simulations aim at constructing of ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of the city of Sofia – typical and extreme features of the special/temporal behaviour, annual means and seasonal variations, etc.

Some preliminary results from the computer simulations will be presented in the present paper.

MODELING TOOLS AND INPUT DATA

The simulations are carried out with the following set of models:

- **WRF** (Shamarock et al. 2007) used as meteorological pre-processor;
- **CMAQ** - the Community Multiscale Air Quality System (Byun et al., 1998, Byun and Ching, 1999), being the Chemical Transport Model (CTM) of the system, and
- **SMOKE** - the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System (CEP, 2003) – the emission pre-processor of Models-3 system.

The large scale (background) meteorological data used in the present study is the NCEP Global Analysis Data with $1^\circ \times 1^\circ$ resolution. WRF and CMAQ nesting capabilities are applied for downscaling the simulations to a 1 km step for the innermost domain (Sofia).

The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions were taken from the TNO inventory (A. Visschedijk et all., 2007). Special pre-processing

procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE. A detailed description of the emission modelling is given in Gadzhev et al. (2013a).

RESULTS, COMMENTS AND DISCUSSION

The most simple and natural atmospheric composition evaluations are, of course, the surface concentrations. By averaging over the whole simulated fields ensemble the mean annual and seasonal surface concentrations can be obtained and treated as respective “typical” daily concentration patterns. Plots of some of these “typical” annual, summer and winter NO₂ and O₃ surface concentrations are shown in Figures 1, 2. The spatial, seasonal and diurnal variations in NO₂ and O₃ surface concentration fields are very well manifested.

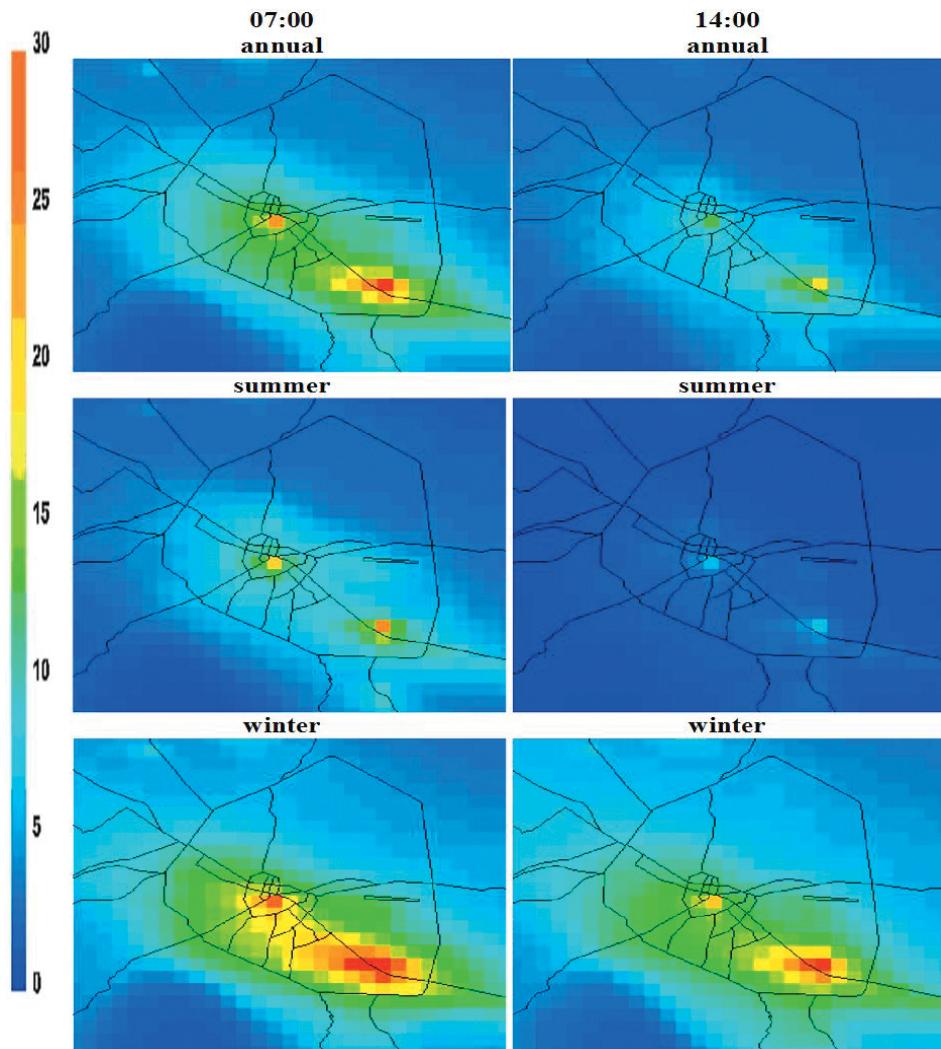


Figure 6. Surface NO₂ “typical” annual, summer and winter concentrations [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] in 07:00 and 14:00 GMT

As it should be expected, because the major NO₂ source in the city is the road transport (surface sources) the surface NO₂ concentrations are higher early in the morning and much smaller at noon, when the atmosphere is usually unstable, and so the turbulence transports the NO₂ aloft more intensively. For the same reasons the concentrations during the winter period are bigger than those in summer, or the annually averaged. The spatial distribution is significantly heterogeneous – the maximal concentrations are formed in the city centre and along the boulevard with most busy traffic.

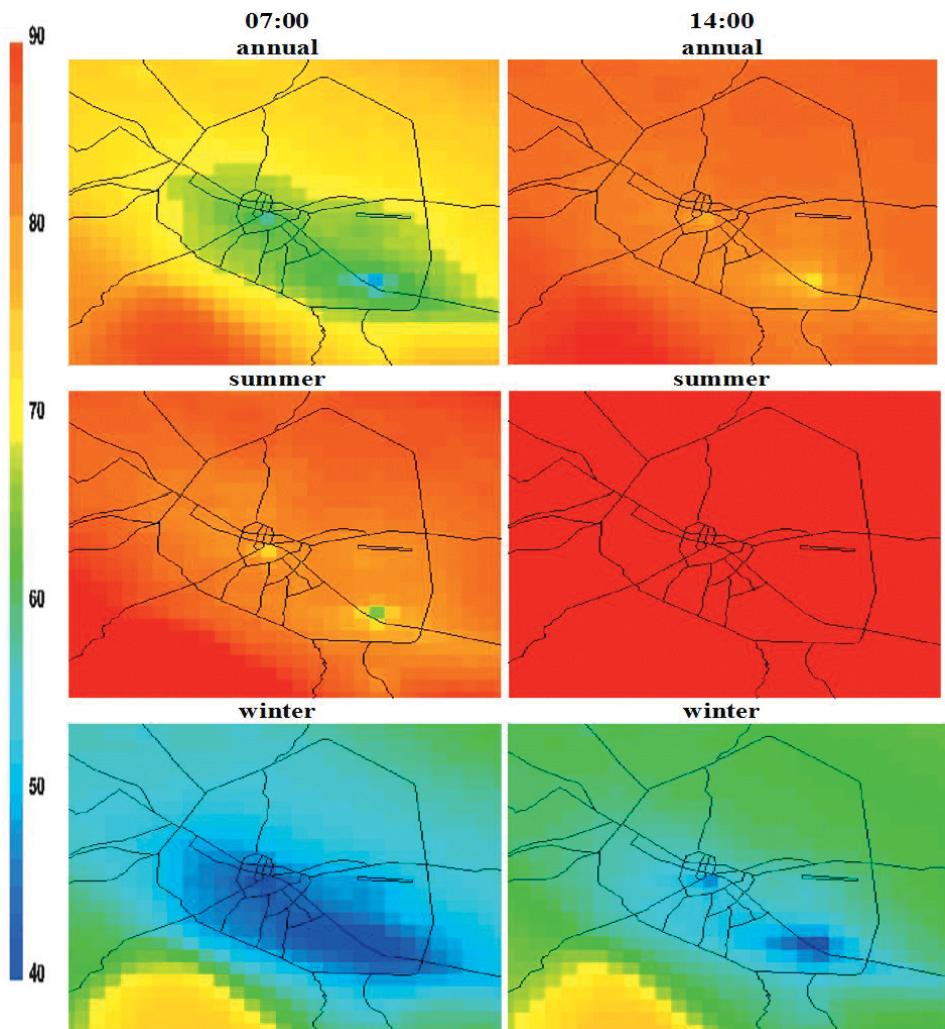


Figure 2. Surface O₃ "typical" annual, summer and winter concentrations [µg/m³] in 07:00 and 14:00 GMT

The behaviour of the surface ozone is more complex. As shown in Gadzhev et al. (2012, 2013 a,b,c,d) the ozone in Bulgaria is to a great extend due to transport from abroad. This is one of the circumstances, because of which the ozone concentrations early in the morning are smaller than at noon (less intensive transport from higher levels). The other is, of course, the ozone photochemistry, which explains both the higher O₃ concentrations at daytime and during the summer and the O₃ gaps in the regions, where the NO₂ concentrations are large.

As already stated, the simulated fields ensemble is large enough to allow statistical treatment. In particular the probability density functions for each of the atmospheric compounds can be calculated, with the respective seasonal and diurnal variations, for each of the points of the simulation grid or averaged over the territory of the city. Knowing the probability density functions means to know everything about the ensemble.

An example of spatial and diurnal variations of the annual ensembles of surface O₃, NO₂, PM10 and PM2.5 behaviour in two points – the typically urban site "Orlov most" and the mountain site "Kopitoto" are shown in Figure 3. Together with the mean, maximal and minimal values there are also the curves denoted by 25, 75, 10 and 90%. These curves show the imaginary concentrations for which the probability of the simulated ones to be smaller is respectively 25, 75, 10 and 90%. Thus the band 25-75 contains 50% and the band 10-90 - 80% of the possible cases. The plots are self explanatory enough and

demonstrate the spatial and diurnal variations of the above mentioned species. As it should be expected the NO_2 , PM10 and PM2.5 concentrations at "Kopitoto" are much smaller as those at "Orlov most", while the O_3 concentrations at both sites are of similar values. For the "Orlov most" site the O_3 concentrations reach maximum around noon, when NO_2 and PM concentrations tend towards local minimum. This is quite natural having in mind the traffic and atmospheric stability diurnal course. On the contrary for the "Kopitoto" site the NO_2 concentrations reach maximum around noon, probably due to the more intensive turbulent mixture and the slope wind effect. The PM10 and PM2.5 concentrations at "Kopitoto" do not have such a significant diurnal variations.

It could be also noticed that the NO_2 , PM10 and PM2.5 ensemble behaviour is significantly asymmetric for both sites.

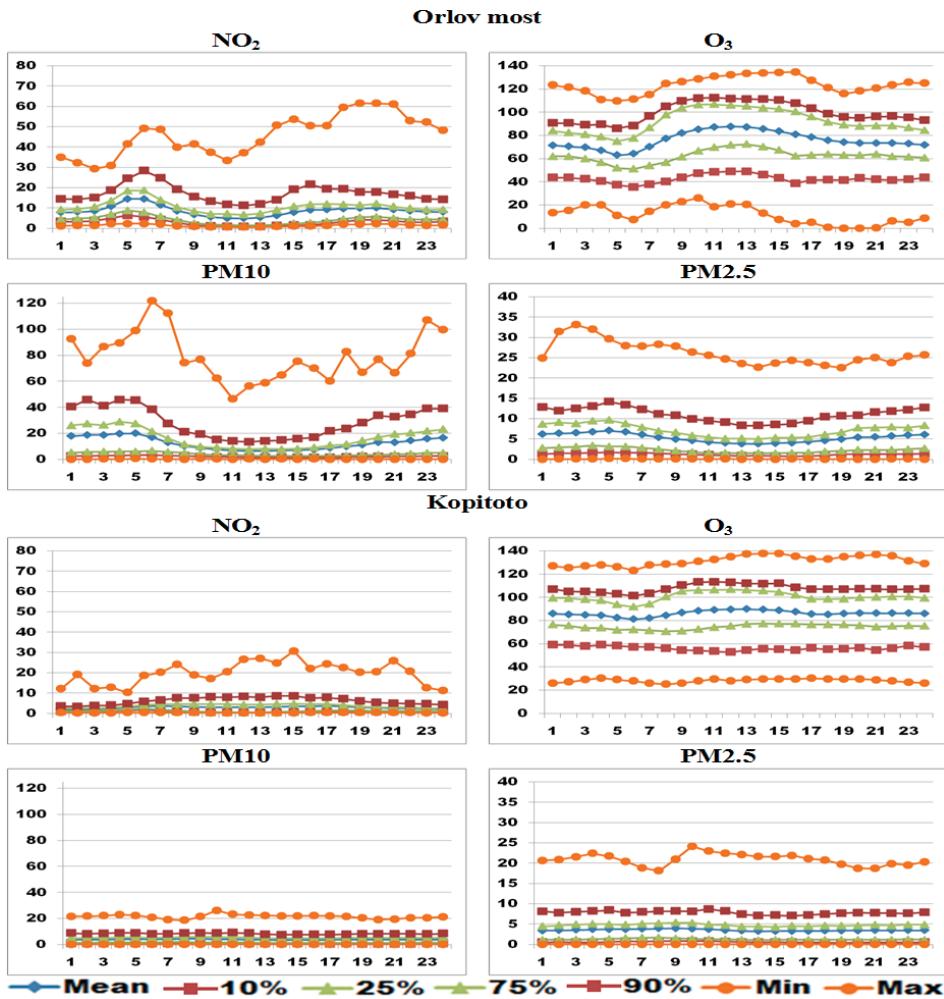


Figure 3. Diurnal variations of the annual NO_2 , O_3 , PM10 and PM2.5 surface concentrations [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], for the typically urban site "Orlov most" and the mountain site "Kopitoto": curves of mean, maximal and minimal values as well as curves show the imaginary concentrations for which the probability of the simulated ones to be smaller is respectively 25, 75, 10 and 90%.

CONCLUSIONS

The demonstrations, presented in the present paper are just a first glance on the atmospheric composition status of the city of Sofia. What can be seen so far is that the results does not defy the common sense and does not oppose the schematic concepts about how the air pollution near earth surface is formed. The numerical experiments are still going on, but when accomplished they will produce a huge volume of information, which have to be carefully analyzed and generalized so that some final conclusions can be

made. It is planned computer simulations to be made for different emission scenarios, so that the contribution of different source categories to the atmospheric composition climate of Sofia can be evaluated.

The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal behaviour could be interesting. Therefore the CMAQ “Integrated Process Rate Analysis” option was applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation in the city of Sofia. These results have still to be generalised and carefully analysed.

ACKNOWLEDGMENTS

The present work is supported by the Bulgarian National Science Fund (grant ДЦВП-02/1/29.12.2009), the Bulgarian Ministry of Education and Science (grant Д01-206/21.07.2014) and the EC-FP7 grant 261323 (project EGI-InSPIRE). Deep gratitude is due to US EPA, US NCEP and EMEP for providing free-of-charge data and software. Special thanks to the Netherlands Organization for Applied Scientific research (TNO) for providing us with the high-resolution European anthropogenic emission inventory.

REFERENCES

- Byun, D., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F.S. Binkowski, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, C. Jang, 1998: Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, Phoenix, Arizona, 264-268.
- Byun, D., J. Ching, 1999: Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. EPA Report 600/R-99/030, Washington DC. <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- CEP Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina 2003.
- Gadzhev, G., D. Syrakov, K. Ganev, A. Brandiyska, N. Miloshev, G. Georgiev, M. Prodanova, 2011a: Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria. Study of the Contribution of Biogenic Emissions, AIP Conf. Proc. 1404, 200, 200-209; doi: 10.1063/1.3659921
- Gadzhev, G., G. Jordanov, K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev, 2011b: Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region, Lecture Notes in Computer Sciences, Dimov, I. S. Dimova, and N. Kolkovska (Eds.): LNCS 6046, c. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 150-157.
- Gadzhev, G., K. Ganev, D. Syrakov, N. Miloshev, M. Prodanova, 2012: Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 50, Nos. 1/2/3/4, 2012, 130-139.
- Gadzhev, G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, M. Prodanova, 2013a: Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, Computers and Mathematics with Applications 65, 402-422.
- Gadzhev, G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, M. Prodanova, 2013b: Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria – Grid Computing Simulations, 9th International Conference, LSSC, 2013, Sozopol, Bulgaria, 484-490.
- Gadzhev, G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, M. Prodanova, 2013c: Analysis of the Processes which Form the Air Pollution Pattern Over Bulgaria, 9th International Conference, LSSC, 2013, Sozopol, Bulgaria, 390-396.
- Gadzhev, G., K. Ganev, D. Syrakov, M. Prodanova, N. Miloshev, 2013d: Some Statistical Evaluations of Numerically Obtained Atmospheric Composition Fields in Bulgaria, Proceedings of 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Madrid, Spain.
- Shamarock et al., 2007: A description of the Advanced Research WRF Version 2. http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf Accessed 15 June 2010.
- Visschedijk, A., Zandveld P., van der Gon, H., 2007: A high resolution gridded European emission database for the EU integrated project GEMS, TNO report 2007-A-R0233/B, The Netherlands.



17th IEEE International Conference on Smart Technologies
IEEE EUROCON 2017
6–8 July 2017, Ohrid, Macedonia

CONFERENCE PROCEEDINGS

Organized by:



Sponsored by:



netcetera



Part Number: CFP17EUR-USB

ISBN 978-1-5090-3842-8

17th IEEE International Conference on Smart Technologies IEEE
EUROCON 2017
6–8 July 2017, Ohrid, Macedonia

CONFERENCE PROCEEDINGS

Organized by:



Sponsored by:



**17th IEEE International Conference on Smart Technologies IEEE
EUROCON 2017
6–8 July 2017, Ohrid, Macedonia**

Editors:
Ljupco Karadzinov
Goga Cvetkovski
Pero Latkoski

©2017 BY IEEE EUROCON 2017
<http://eurocon2017.org/>
June 2017

Welcome to IEEE EUROCON 2017



Dear conference participants,

It is with great pleasure to welcome you at the 17-th IEEE International Conference on Smart Technologies EUROCON 2017. This conference is organized by one of the 10 geographical units of IEEE, and is at the same rank as major conferences organized by the IEEE Societies as IEEE technical organizational units. EUROCON is a flagship event of the IEEE Region 8 (Europe, Middle East and Africa) held every two years in a different country with participants from all over the world. It is a major international forum for the exchange of ideas, theory basics, design methodologies, techniques and experimental results between academia, research institutions and practitioners from industry. It has achieved a considerable success during the past 16 editions in all fields of electrical and electronic engineering, ICT and computer science covered by IEEE Societies.

The technical program includes plenary sessions with 7 invited keynote lectures, 15 regular technical track sessions, 4 special sessions (SS) on highly specialized topics reporting technical trends and breakthroughs within the scope of the conference, 7 special thematic areas (STA) with several special sessions, poster session, 4 panel discussions (PD), 2 workshops and a tutorial. The 48 technical sessions are grouped in four tracks:

- Information and Communication Technologies,
- Circuits, Systems and Signal Processing,
- Power Engineering and Energy,
- Industrial and Consumer Applications.

The conference received 233 research papers submissions and after the rigorous peer review, only 172 papers have been accepted for presentation at the conference sessions. It is our special privilege and honor that this year the conference will be opened by our Honorary Chairs, the 2017 IEEE President Karen Bartleson and 2017-2018 IEEE R8 Director Margaretha Eriksson. The conference also includes a student competition with the EUROCON 2017 Best Student Paper Award, IEEE Region 8 Best Student Paper Contest 2017 presentations and awards, as well as presentations from IEEE Young Professionals (YP) and IEEE Professional Activities (PA) affinity groups.

The Conference this year will be held at the Metropol Lake Resort, located about 7 km south from the magnificent city of Ohrid. It is referred to as the "Jerusalem of the Balkans" due to its richness in churches, picturesque sites and monuments, while the Ohrid Lake, as the oldest in Europe, has unique flora and fauna with more than 200 endemic species. Both, the city and the lake, are protected as UNESCO Cultural and Natural World Heritage and are regarded as one of the best summer destinations.

In the name of the organizing committee and myself, I would like to thank to all sponsors for the support to the conference and particularly to the Saints Cyril and Methodius University, Skopje, Macedonia and all the colleagues from the Faculty of Electrical Engineering and IT, and Faculty of Computer Science and Engineering, as well as all the members of the Ex Com of the IEEE Republic of Macedonia Section which celebrates its 20-th anniversary this year. Also, special thanks to our major sponsors, the Neotel and Netcetera companies.

A conference is not just a collection of paper presentations and attending technical sessions. It is an occasion on which people with common interest come together and confer, establish further cooperation, make new contacts and life long friendships. On behalf of the organizing committee, I wish your days at the IEEE EUROCON 2017 to be very productive and enjoyable.

Prof. Dr. Ljupco Karadzinov,
IEEE EUROCON 2017 General Chair,
IEEE Republic of Macedonia Section Chair.

Air Quality Index Evaluations For Sofia City

Ivelina Georgieva

Department of Geophysics
NIGGG - BAS
Sofia, Bulgaria
iivanova@geophys.bas.bg

Vladimir Ivanov

Department of Geophysics
NIGGG - BAS
Sofia, Bulgaria
vivanov@geophys.bas.bg

Abstract— Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in the city of Sofia have been recently performed and an ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of Sofia – typical and extreme features of the special/temporal behavior, annual means and seasonal variations, etc. has been constructed.

The simulations were carried out using the US EPA Models-3 system. The meteorological data needed for the models that was used is from the NCEP Global Analysis Data with 1°x1° resolution. The WRF and CMAQ nesting capabilities are applied for downscaling the simulations to a 1 km step for the innermost domain.

For Bulgaria and smaller domains the emissions input is from the national emission inventory, prepared by the Ministry of Environment and Water of Bulgaria (MOEW), while outside the country the emissions were taken from the TNO inventory. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE.

For describing the ambient pollutant mix, an overall air quality index (AQI) is constructed, which makes it possible to describe the air quality in a simple, understandable for the general public way.

The general conclusion that can be made for the Sofia city is that the air quality status of Sofia is not so good (evaluated with a spatial resolution of 1km). AQI status falls mostly in "Low" and "Moderate" bands, but the recurrence of cases with Very High pollution is close to 20% mostly at the city centre.

Keywords— air quality, numerical modelling, HPC and grid computing, ensemble of numerical simulation results, Air Quality Indices

I. INTRODUCTION

The objective of the present work is calculation of the Air Quality (AQ) impact on human health and quality of life in urban area - Sofia city. The AQ impact on human health and quality of life is an issue of great social significance. Evaluating this impact will give scientifically robust basis for elaborating efficient short term measures and long term strategies for mitigation of the harmful effects of air pollution on human health and quality of life.

The AQ impact on human health and quality of life is evaluated in the terms of Air Quality Indices (AQI), which give an integrated assessment of the impact of the whole range of pollutants. In the current study the AQI evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ in Sofia city carried out with good resolution using up-to-date modeling tools and detailed and reliable input data.

The Air Quality (AQ) is a key element for the well-being and quality of life of European citizens. An association between the increased incidence of respiratory, cardiovascular, neoplastic diseases, the reduced life expectancy and air pollution has been robustly established [1], [2]. According to the World Health Organization (WHO), air pollution severely affects the health of European citizens [3], [4], between 2.5 and 11% of the total number of annual deaths are due to air pollution). There is considerable concern about impaired and detrimental air quality conditions over many areas in Europe, especially in urbanized areas, in spite of about 30 years of legislation and emission reduction. Current legislation [5], [6] requires informing the public on AQ, assessing air pollutant concentrations throughout the whole territory of Member States and indicating exceedances of limit and target values, forecasting potential exceedances and assessing possible emergency measures to abate exceedances using modeling tools.

II. METHODOLOGY

A. Air Quality Indices:

Calculation of the AQ impact on human health and quality of life in Sofia city is the objective of the present study. The impact is calculated in the terms of the so called Air Quality Indices (AQI) – an integral characteristic directly measuring the effects of AQ on human health. The calculations are made on the basis of long term AQ simulations, which makes it possible to reveal the climate of AQI spatial/temporal distribution and behavior.

The AQI is defined as a measure of air pollution seen in the context of its impact on quality of life. The index calculated in base on air pollutions concentrations obtained from a observations or from numerical modeling. The index gives an integrated assessment of the impact of pollution on human health in a simple understandable for people way. The index is a linear function of the concentration of pollutants and it is defined in several segments [7]:

$$I = ((I_{high} - I_{low}) / (c_{high} - c_{low})) (c - c_{low}) \quad (1)$$

where:

I - the AQI,

c - the pollutant concentration,

c_{low} - the concentration breakpoint that is $\leq c$,

c_{high} - the concentration breakpoint that is $\geq c$,

I_{low} - the index breakpoint corresponding to c_{low} ,

I_{high} - the index breakpoint corresponding to c_{high} .

The Air quality index falls in one of the ranges of the dimensionless scale. Converting the concentrations into a dimensionless scale associated with an intuitive color code, a linguistic description and health preposition.

Pretty often in order to evaluate the air quality situation in European cities, all detailed measurements are transformed into a single relative figure: the Common Air Quality Index (CAQI) and this index have 5 levels using a scale from 0 (very low) to > 100 (very high). The index is based on 3 pollutants of major concern in Europe: PM₁₀, NO₂, O₃ and will be able to take into account to 3 additional pollutants (CO, PM_{2.5} and SO₂).

One of the most commonly used air quality index is the UK Daily Air Quality Index [8], also used in Bulgaria [9-12].

Some preliminary results from the computer simulations the atmospheric composition climate in urban scale are demonstrated in [12]. The period of the simulations were performed for 3 years (2010 to 2012) and the focus of the paper is mainly on the surface concentrations fields of some pollutants and their behavior in the city. Based on the results for the concentrations the AQI is calculated, but its behavior is not extensively illustrated and discussed. The present paper is dedicated exclusively to description of the AQI behavior and so it is discussed in much more details.

The breakpoints between index values are defined for each pollutant separately and the overall index is defined as the maximum value of the index. Different averaging periods are used for different pollutants. Each of the bands comes with advice for at-risk groups and the general population (TAB. I).

The reference levels and Health Descriptor used in the tables are based on health-protection related limit, target or guideline values set by the EU, at national or local level or by the WHO.

TABLE I.
AIR QUALITY INDICES AND THEIR HEALTH IMPACT

Banding	Value	Health Descriptor
Low	1–3	Effects are unlikely to be noticed even by individuals who know they are sensitive to air pollutants
Moderate	4–6	Mild effects, unlikely to require action, may be noticed amongst sensitive individuals.
High	7–9	Significant effects may be noticed by sensitive individuals and action to avoid or reduce these effects may be needed. Asthmatics will find that their 'reliever' inhaler is likely to reverse the effects on the lung.
Very High	10	The effects on sensitive individuals described for 'High' levels of pollution may worsen.

B. Air quality computer simulations

The AQI evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ in Sofia city carried out with good resolution using up-to-date modeling tools and detailed and reliable input data [13-19]. All the simulations are based on

the US EPA Model-3 system. The system consists of three components:

WRF - is Meteorological model (The Weather Research and Forecasting) [20] model used as meteorological pre-processor. WRF model is a numerical weather prediction (NWP) and atmospheric simulation system designed for both research and operational applications.

CMAQ - the Community Multiscale Air Quality System [21-23], being the Chemical Transport Model (CTM) of the system.

SMOKE - the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modeling System [24] – is the emission pre-processor of Models-3 system. SMOKE currently supports BEIS (Biogenic Emissions Inventory System) mechanism, versions 3.13 [25]. The model is fed with gridded land use data. It computes the normalized emissions for each grid cell and land use category. For preparing the girded land use file GIS technology is applied to USGS (US Geological Survey) data base with resolution 1 km.

C. Grid computing:

The calculations were implemented on the Supercomputer System Avitohol at IICT-BAS. Which consists of 150 HP Cluster Platform SL250S GEN8 servers, each one equipped with 2 Intel Xeon E5-2650 v2 8C 2600 GHz CPUs and 64GB Ram per server. The storage system is HP MSA 2040 SAN with a total of 96 TB of raw disk storage capacity. All the servers are interconnected with fully non-blocking FDR Infiniband, using a fat-tree topology.

The computer resource requirements for WRF, SMOKE and CMAQ simulations are rather big, [26] which can be seen in Table II. That is why the planned numerical experiments were organized in effective HPC environment. The ACIQLife simulations were organized in two separate jobs: one for WRF simulations and one for SMOKE, CMAQ and post-processing procedures. The output storage from the model is too large. Not all the information from the output is so valuable for the further considerations about this study, so a post-processing procedure and respective software were developed, to “filtered” the output information and only the necessary of it was kept.

An hourly basis of the surface concentrations of the following important pollutants:

- NO₂, NO, O₃, NO₃, OH, HO₂, N₂O₅, HNO₃, HONO, PNA (Peroxonitric acid), H₂O₂, CO, FORM, ALD2, C₂O₃, PAN (Peroxyacetyl nitrate), PACD (Peroxyacetic acid), PAR, OLE, FACD (Formic acid), AACD (Acetic Acid), ETH, TOL, CRES (Cresol), TO₂, XYL, MGLY (Methylglyoxal), ISOP, ISPD (Products of isoprene rxns), SO₂, SULF (H₂SO₄ Sulfuric acid), UMHP (Methanediol), TERP, NH₃ (gases34)

- PSO₄, PNH₄, PNO₃, POA, PEC (aerosol—5)

- SOAA, SOAB (Anthropogenic and Biogenic secondary organic aerosol—2)

- FPRM, CPRM (fine and coarse PM—2).

from the CMAQ output were kept:

TABLE II. COMPUTER RESOURCE REQUIREMENTS FOR ACIQLIFE

	1 Day simulation at 16CPU		
	WRF	CMAQ and SMOKE	Total
Time	3h	2h	5h
HDD	530MB	970MB	1,5GB

The WRF/CMAQ simulations were performed day by day for 7 years—from 2008 to 2014 for the simulations for city of Sofia. Thus a quite extensive data base was created, which could be used for different studies and considerations of the main features and origins of the atmospheric composition in Sofia, including the AQI climate.

III. INPUT DATA

Carrying out reliable, comprehensive and detailed studies of the influence of the parameters and characteristics of lower atmosphere on quality of life and health risks for the population of our country requires various types of data such as: meteorological and chemical fields and measurements – data for the health status, AQ data, emission inventories, physiographic and demographic data. The data is necessary as an input to the respective studies, as well as for evaluation and validation of the modeling approaches and tools. The complete coherence of models and data is of crucial importance for the success of the present work:

A. Meteorological data:

The needed meteorological input for the models that was used is from the NCEP Global Analysis Data with $1^\circ \times 1^\circ$ resolution. The WRF and CMAQ nesting capabilities are applied for downscaling the simulations to a 1 km step for the innermost domain (Sofia) Fig.1.

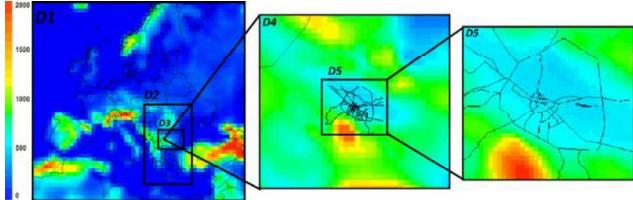


Fig. 1. Model domains - D1 81x81 km (Europe), D2 27x27 km (Balkan Peninsula), D3 9x9 km (Bulgaria), D4 3x3 km (Sofia municipality) and D5 1x1 km (Sofia city).

B. Emission data:

The TNO high resolution inventory - $0.25^\circ \times 0.125^\circ$ longitude-latitude, is exploited, produced by proper disaggregation of the EMEP 50-km inventory data base [27], [28]. GIS technology is applied as to produce area and large point source input from this data base. The TNO emissions are distributed over 10 SNAPS (Selected Nomenclature for Air Pollution) classifying pollution sources according the processes leading to harmful material release to the atmosphere [29].

For Bulgaria and smaller domains the emissions input is from the national emission inventory, prepared by the Ministry of Environment and Water of Bulgaria (MOEW). Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions are calculated by the SMOKE model.

IV. MAIN RESULTS

The simulations aimed at constructing of ensemble of daily simulations for a large period (7 years—from 2008 to 2014). This ensemble should be comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of the city of Sofia. The computer simulated ensemble is utilized for studying calculation of AQI, constructing the AQI climate in Sofia and analysis of its spatial - temporal behavior.

The results from the computer simulations are presented here, for the domain with the desired horizontal resolution 1km for the region of Sofia city.

A. Annual plots of the recurrence of the AQI in the "Low", "Moderate" and "High" bands over Sofia city.

Fig. 2 shows annual recurrence of cases with different AQI for Sofia in two chosen hours - 07:00 GMT and 15:00 GMT.

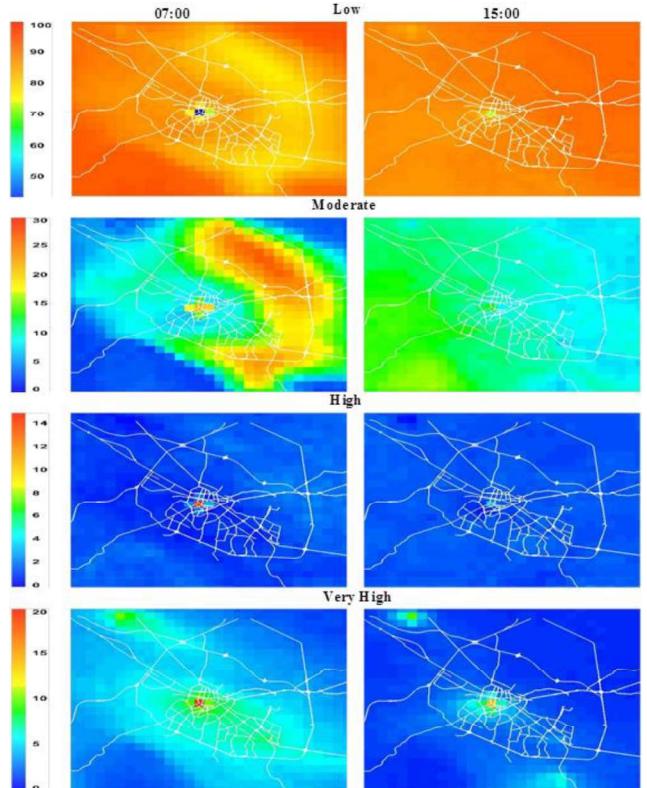


Fig. 2. Annual plots of the recurrence [%] of the AQI - Low, Moderate, High and Very High bands in Sofia.

It can be seen that most areas with high recurrence of cases with lower AQI status are in the city center and the North part of the ring road of Sofia early in the morning due to the weather conditions and higher NO_2 concentrations from the road transport. This could be seen at Low and Moderate range maps in the morning hours. The major NO_2 sources in the city are the surface sources (road transport) and the surface NO_2 concentrations are higher in the morning and smaller at noon (the atmosphere is mostly unstable, and intensively turbulence transports of NO_2 aloft). The maximal concentrations which are directly linked to the worse AQI status are in the city centre and along the boulevard with most busy traffic.

In Moderate band at 15:00 GMT it can be also noticed about 20% recurrence with not so good AQI status over Vitosha mountain. Higher values over the Vitosha mountain in the afternoon are due to the higher concentration of O_3 in mountain areas and intensive ozone transport from higher levels (intensive turbulence during midday). The behavior of the surface ozone is complex. The O_3 in Bulgaria is to a great extent due to transport from abroad [13-19]. The O_3 concentrations early in the morning are smaller, because less intensive transport from higher levels, and higher at noon and afternoon (turbulence atmosphere and O_3 photochemistry).

High recurrence of cases with "High" and "Very High" values appear again in the city centre and an area in the West part of the city, where a Coca Cola factory and oil storage depot Gaztrade are situated. About 20% "Very High" pollution in the city centre and 10% near Coca Cola factory and oil storage depot Gaztrade can be observed. Bad AQI status from the "Very High" band never disappears.

B. Diurnal variations of the annually and seasonal averaged recurrence of the different AQI values for Sofia and for different point in Sofia.

The graphics on Fig. 3 show the annual and seasonal recurrence of the different AQI values (from 1 to 10) averaged for the whole domain Sofia city.

The most probable indices are AQI1, AQI2 and AQI3 (they fall in "Low" band) with recurrence about 40%. In spring and summer the recurrence of AQI4 (Moderate band) in the afternoon becomes about 20%. AQI10 "Very High" band - is noticed in all seasons with recurrence of about 10%. The most probable indices have well displayed seasonal and diurnal course.

Fig. 4 shows the recurrence of the AQI for 6 points in Sofia, some of which are the hot spots of the city. The points are chosen because of their locations - two in the city centre: Orlov most and Ruski Pametnik, one at the North part of the Ring road: Botevgradsko chaussée, one in the South part of the city: Zoo and two mountain/suburban points - Kopitoto and Pancharevo

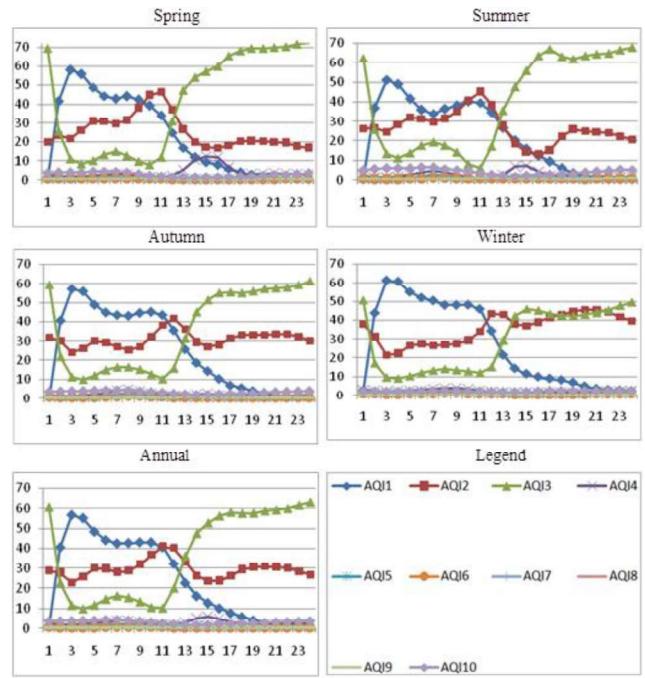


Fig. 3. Diurnal variations of the annual and seasonal recurrence [%] of the different AQI values for Sofia.

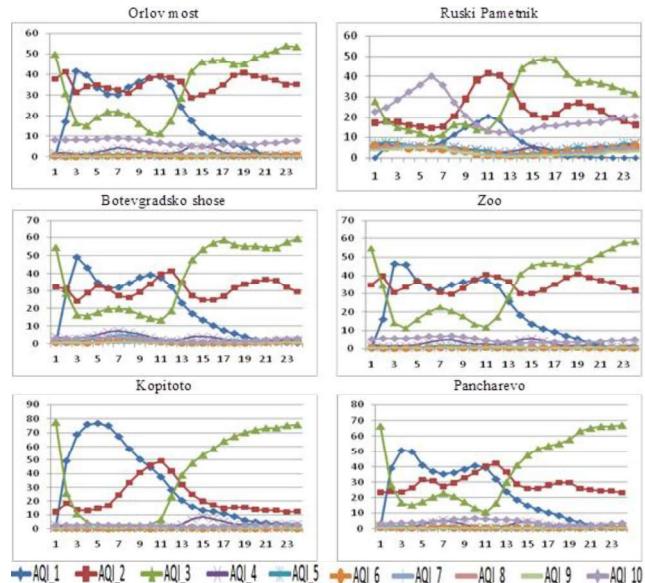


Fig. 4. Diurnal variations of the annual recurrence [%] of the different AQI values for 6 different points : Orlov most, Ruski Pametnik, Botevgradsko chaussée, Zoo, Kopitoto and Pancharevo.

The Orlov most and Ruski pametnik are two locations in the city centre with most busy automobile traffic. The results are pretty much the same, but for the Ruski pametnik it could be seen that the AQI10 (Very High band) is about 20% during the day and reaches 40% in the morning hours. This point is one of the busiest traffic routes and the highest values here are

probably due to the road transport (surface sources) and the atmospheric stability at the morning.

For Botevgradsko chaussée and the Zoo points the most probable indices are AQI1, AQI2 and AQI3. For Botevgradsko chaussée point AQI4 has two maximums - in the morning and in the afternoon. The AQI10 recurrence for the Zoo point is about 10% in the morning, and becomes lower in the rest of the day. Probable reason for higher value of AQI10 recurrence in the morning are the high NO₂ concentrations due to atmospheric stability and hampered turbulent transport, as well as intensive road traffic.

In the two mountain points - Kopitoto and Pancharevo the most probable indices are AQI1, AQI2 and AQI3, which fall in Low band and the other indices values are with negligible probability of occurrence.

V. CONCLUSIONS

The simulations for Sofia city show that the air quality status in the city of Sofia is not so good (evaluated with a spatial resolution of 1km).

AQI status falls mostly in "Low" and "Moderate" bands, but the recurrence of cases with Very High pollution is close to 20% mostly at the city centre.

The pollution in the city is probably due to the surface sources like road transport and also the TPPs in the city.

Apart from these general features the climatic behavior of the AQI probabilities is rather complex with significant spatial, seasonal and diurnal variability. The areas with slightly worse AQ status are not necessarily linked to the big pollution sources. Wide rural and even mountain regions can also have significant probability for AQI from the Moderate range.

The hot spots in Sofia city, where index with higher impact is AQI10 are in the city centre - Orlov most and Ruski pametnik. The AQI10 (Very High band) is high - about 20 % during the day and reaches 40 % in the morning hours

ACKNOWLEDGMENT

This present work is supported by the EC-FP7 grant PIRSES-GA-2013-612671 (project REQUA), the H2020 project VI-SEEM, GA no.675121 and NSF grant № ДН04/2 - 13.12.2016

Special thanks are due to US EPA and US NCEP and TNO for providing free-of-charge data and software and high-resolution European anthropogenic emission inventory.

The author of the present paper - I. Georgieva is World Federation of Scientists grant holder.

REFERENCES

- [1] Brunekreef B, Holgate S: Air pollution and health., Lancet 2002, 360:1233-1242
- [2] Atkinson, R W, Yu D, Armstrong B, Pattenden S, Wilkinson P, Doherty R, Hean MR, Anderson HR., Concentration–Response Function for Ozone and Daily Mortality: Results from Five Urban and Five Rural U.K. Populations, Environ Health Perspect, 2012; 120:1411–1417
- [3] Health Aspects of Air Pollution. Results from the WHO Project Systematic Review of Health Aspects of Air Pollution in Europe, World Health Organization (WHO), 2004.
- [4] Fact Sheet Number 187, World Health Organization (WHO), 2000.
- [5] European Parliament (2002) Directive 2002/3/EC of 12 February 2002 relating to ozone in ambient air, Official Journal of the European Communities (9.3.2002) L 67: 14-30.
- [6] European Parliament (2008): Directive 2008/50/EC of the European Parliament and of the Council of 21 May 2008 on ambient air quality and cleaner air for Europe, Official Journal of the European Union (11.6.2008), L 152: 1-44.
- [7] EPA (2009). Technical assistance document for the reporting of daily air quality - the Air Quality Index (AQI). EPA- 454/B-09-001, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina 27711.EU (2007a). <http://ec.europa.eu/environment/air/legis.htm> (Accessed 2012/06/22).
- [8] Leeuw, F. de, Mol, W., (2005), Air Quality and Air Quality Indices: a world apart. ETC/ACC Technical Paper 2005/5 http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACC_TechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf
- [9] Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Ganev, K., Miloshev, N., Slavov, K., (2012), Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1487, p. 88 - 94; DOI: 10.1063/1.4758945.
- [10] Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., (2013) Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to Sofia city, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1561, p. 120-132, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4827221>
- [11] Georgieva, I., (2014) Study of the air quality index climate for Bulgaria, Proc. of the international conference on numerical methods for scientific computations and advanced applications, may 19-22, 2014, Bansko, ISBN978-954-91700-7-8, p. 39-42.
- [12] Georgieva I., G.Gadzhev, K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev (2015) Numerical study of the air quality in the city of Sofia – some preliminary results, International Journal of Environment and pollution, Vol. 57, Nos. 3/4, 162-174,
- [13] Gadzhev, G., Syrakov, D., Ganev, K., Brandyska, A., Miloshev, N., Georgiev, G., Prodanova, M., (2011) Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria. Study of the Contribution of Biogenic Emissions, AIP Conf. Proc. 1404, 200, p.200-209. doi: 10.1063/1.3659921
- [14] Gadzhev, G. Jordanov, G. Ganev, K. Prodanova, M. Syrakov, D. Miloshev N. (2011) Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region, Lecture Notes in Computer Sciences, Dimov, I. S. Dimova, and N. Kolkovska (Eds.): LNCS 6046, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, p.150-157.
- [15] Gadzhev, G., Ganev, K., Syrakov, D., Miloshev, N., Prodanova, M., (2012) Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 50, Nos. 1/2/3/4, 2012, p. 130-139.
- [16] Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., (2013) Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, Computers and Mathematics with Applications 65, p. 402-422.
- [17] Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Atanasov, E., Miloshev, N. (2013) Multi-scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria. NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security, 137, pp. 381-385. DOI: 10.1007/978-94-007-5577-2_64

- [18] Gadzhev G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, and M. Prodanova (2014): Analysis of the Processes Which Form the Air Pollution Pattern over Bulgaria, in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, pp. 390–396, DOI: 10.1007/978-3-662-43880-0 55, © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014
- [19] Gadzhev G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, and M. Prodanova (2014): Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria – Grid Computing Simulations, in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, pp. 484–490, DOI: 10.1007/978-3-662-43880-0 55, © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014.
- [20] Shamarock et al., (2007) “A description of the Advanced Research WRF Version 2”, http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
- [21] Byun, D., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F.S. Binkowski, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, and C. Jang (1998) Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, 264-268.
- [22] Byun, D., Ching, J. (1999) Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. EPA Report 600/R-99/030, Washington DC. <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- [23] CMAQ user guide, (2006). [Online] Available from: <https://www.cmascenter.org/help/documentation.cfm?model=cmaq&version=4.6>
- [24] CEP (2003) Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina.
- [25] Schwede, D., G. Pouliot, and T. Pierce (2005): Changes to the Biogenic Emissions Inventory System Version 3 (BEIS3), Proc. of 4th Annual CMAS Models-3 Users's Conference, September 26-28, 2005, Chapel Hill, NC.
- [26] Todorova, A., Syrakov, D., Gadzhev, G., Georgiev, G., Ganev, K.G., Prodanova, M., Miloshev, N., Spiridonov, V., Bogatchev, A., Slavov, K. (2010) Grid computing for atmospheric composition studies in Bulgaria. Earth Science Informatics, 3 (4), pp. 259-282. DOI: 10.1007/s12145-010-0072-1
- [27] Vestreng V., (2001), Emission data reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the spatial distribution of emissions. Meteorological Synthesizing Centre - West, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway, Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1/2001.
- [28] Vestreng V., K. Breivik, M. Adams, A. Wagner, J. Goodwin, O. Rozovskaya, J.M. Pacyna, (2005), Inventory Review 2005 (Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive), Technical Report MSC-W 1/2005, EMEPSyrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Ganev, K., Miloshev, N., Slavov, K., (2012), Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1487, p. 88 - 94; DOI: 10.1063/1.4758945.
- [29] Visschedijk, A., Zandveld P., van der Gon, H. (2007) A high resolution gridded European emission database for the EU integrated project GEMS, TNO report 2007-A-R0233/B, The Netherlands

High Performance Computing Simulations of the Atmospheric Composition in Bulgaria and the City of Sofia

Ivelina Georgieva¹, Georgi Gadzhev¹, Kostadin Ganev¹, Dimitrios Melas², Tijian Wang³

¹*National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography – Bulgarian Academy of Sciences, 1113 Sofia, Bulgaria*

²*Aristotle University of Thessaloniki Faculty of Sciences School of Physics, 54124 Thessaloniki, Greece*

³*School of Atmospheric Sciences, Nanjing University, Nanjing, China*

E-mails: iivanova@geophys.bas.bg ggadzhev@geophys.bas.bg kganev@geophys.bas.bg
melas@auth.gr tjwang@nju.edu.cn

Abstract: Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Bulgaria and Sofia have been recently performed. The US EPA Model-3 system was chosen as a modeling tool. A very extensive database was created from simulations which was used for different studies of the atmospheric composition, including the Air Quality (AQ) climate.

Keywords: High Performance Computing (HPC), simulations, atmospheric composition, air pollutants.

1. Introduction

The atmospheric composition studies were based on extensive computer simulations carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data. All the simulations were based on the US EPA (Environmental Protection Agency) Model-3 system, which consists of three models: WRF (Weather Research and Forecasting) used as meteorological pre-processor; CMAQ – the Community Multiscale Air Quality System, being the Chemical Transport Model (CTM); SMOKE (Sparse Matrix Operator Kernel Emissions) Modelling System– the emission pre-processor. The simulations were performed for 7-year period (2008-2014) with Two-Way Nesting mod on. Carrying out reliable, comprehensive and detailed studies of the influence of the parameters and characteristics of lower atmosphere requires various types of data such as meteorological and chemical fields and measurements – Air Quality (AQ) data, emission inventories and physiographic data. The data is necessary as an input to the respective studies, as well as for evaluation and validation of the modelling approaches and tools [1-5].

A very extensive database was created from the numerical simulations and this data was used for different studies of the atmospheric composition, including the AQ climate. The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each one of these processes for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal behaviour could be helpful for understanding the atmospheric composition and air pollutants behaviour. Therefore the CMAQ “Integrated Process Rate Analysis” option was applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation. Different characteristics of the numerically obtained concentration fields, as well as evaluating the impact of air pollutants on quality of life in the term of AQI and of the contribution of different processes will be demonstrated in the present paper.

2. Methodology

The simulations were performed using the US EPA models three system.

Meteorological model WRF [6]. The Weather Research and Forecasting (WRF) model is a Numerical Weather Prediction (NWP) and atmospheric simulation system designed for both research and operational applications. It supplies various dispersion models, including presented below model CMAQ with input meteorological fields. WRF is suitable for a broad span of applications across scales ranging from large-eddy to global simulations.

Meteorological data. The large-scale (background) meteorological fields, used by the application were taken from the NCEP Global Analysis Data with $1^\circ \times 1^\circ$ resolution. The WRF and CMAQ nesting capabilities were used to downscale the simulations to a 9 km for domain D3 – Bulgaria, and to a 1 km horizontal resolution for the innermost domain – Sofia. The simulations were carried out for five nested domains (Fig. 1).

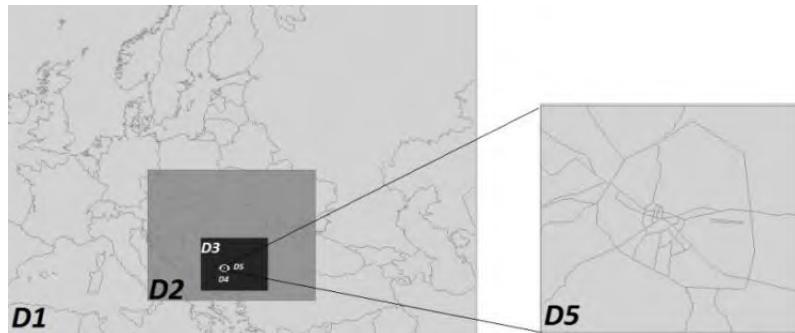


Fig. 1. Model domains: D1 81×81 km (Europe); D2 27×27 km (Balkan Peninsula); D3 9×9 km (Bulgaria); D4 3×3 km (Sofia municipality); D5 1×1 km (Sofia city)

Emission model SMOKE [7]. The Sparse Matrix Operator Kernel Emissions (SMOKE) was designed to integrate the emission data using sparse-matrix algorithms. SMOKE was created to allow emissions data for the AQ model’s needs.

SMOKE provides a mechanism for preparing specialized inputs for AQ modelling research, and it makes AQ forecasting possible. SMOKE can process criteria gaseous pollutants and has no limitation regarding the number or types of pollutants it can process. The purpose of SMOKE is to convert the resolution of the emission inventory data to the resolution needed by an AQ model.

Emission data. The Bulgarian emission inventory was used as an emission input for Bulgaria. Special pre-processing procedures were created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. GIS (Geographic Information System) technology is applied as to produce area and large point source input from this data base. Outside the country the TNO (Netherlands Organisation for Applied Scientific Research) high resolution inventory was exploited $0.25^\circ \times 0.125^\circ$ (about 20×15 km) and the emissions were distributed over 10 SNAPs category [8]. The inventory is produced by proper disaggregation of the EMEP 50-km inventory data base [9, 10]. Currently, SMOKE supports Area, Mobile and Point Sources emissions processing and also includes biogenic emissions modelling through both a rewrite of the Biogenic Emission Inventory System (BEIS3) [11].

The Atmosphere Composition Model CMAQ [12-14]. The Community Multiscale Air Quality (CMAQ) modelling system is a tool for transport and chemical transformations of pollutants in the atmosphere and it is a part of US EPA Models-3 System. CMAQ as part of the system used meteorological data prepared by the model WRF and emission data, prepared by the model SMOKE. CMAQ is Eulerian model, “one atmosphere”, which takes into account interactions between pollutants (about 100 species) in various dynamic scales. The model handles complex compositions of pollutants and configuration of sources, modelled transport and diffusion in a dynamic environment in wide time range – from minutes to days and weeks, and in the corresponding spatial scales – from local to global.

3. Grid computing

As it was stated above the WRF/CMAQ simulations were performed day by day for 7-year period. Thus a very extensive database was created, which could be used for different studies and considerations of the main features and origins of the atmospheric composition in different scales, including the AQ climate. The computer resource requirements for the model (WRF, SMOKE and CMAQ) simulations are rather big [15] (Tables 1 and 2) and that is why the numerical experiments were organized in effective HPC environment. The simulations were organized in two separate jobs: one job for WRF simulations and one for SMOKE, CMAQ and post-processing procedures. This makes the jobs run time for 6 days real time fairly reasonable. The calculations were implemented on the Supercomputer System Avitohol at IICT-BAS (Institute of Information and Communication Technologies-Bulgarian Academy of Sciences). This supercomputer consists of 150 HP Cluster Platform SL250S GEN8 servers, each one equipped with two Intel Xeon E5-2650 V2 8C 2600 GHz CPUs and 64GB RAM per server. The storage system is HP MSA 2040 SAN with a total of 96 TB of raw disk storage capacity. All the servers are interconnected with fully non-blocking FDR Infiniband, using a fat-tree topology.

Table 1. Computer resource requirements for models

Time/HDD	1 Day simulation at 16 CPU		
	WRF	CMAQ and SMOKE	Total
Time	3 h	2 h	5 h
HDD	530 MB	970 MB	1.5 GB

Table 2. Computer resource requirements for CMAQ model

Time	CPU/HDD	D2/27 km	D3/9 km	D4/3 km	D5/1 km	Total
2 CPU (min)	2 h 40 min	1 h 10 min	1 h 36 min	32 min	5 h 58 min	
	1 h 20 min	35 min	30 min	10 min	2 h 35 min	
	20 min	20 min	17 min	6 min	63 min	
	30 min	20 min	12 min	5 min	67 min	
1 day	HDD (MB)	255 MB	420 MB	70 MB	145 MB	890 MB
7 years	HDD (GB)	636 MB	1048 MB	175 MB	362 MB	2221 MB

The model output storage, however, is too large. Not all the information from the model output is so valuable for further air quality and environmental considerations, so an additional post-processing procedure and respective software (the program XTRACT) were developed, to reduce the information (only the necessary information to be kept) and the needed storage space. This procedure allows not only the number of output compounds to be reduced but also the number of the vertical levels. Another post-processing procedure was applied for statistical treatment of the results to present different statistical characteristics as the mean, minimum and maximum concentrations, probability density, bias, errors and etc., not only for the whole domain but also for selected points of interest. What are recently kept from the CMAQ output on an hourly basis are the surface concentrations of the following most important pollutants:

- 34 gases – NO₂, NO, O₃, NO₃, OH, HO₂, N₂O₅, HNO₃, HONO, PNA, H₂O₂, CO, FORM, ALD₂, C₂O₃, PAN, PACD, PAR, OLE, FACD, AACD, ETH, TOL, CRES, TO₂, XYL, MGLY, ISOP, ISPD, SO₂, SULF (H₂SO₄), UMHP, TERP, NH₃;
- 5 aerosols – PSO₄, PNH₄, PNO₃, POA, PEC;
- 2 Anthropogenic and Biogenic secondary organic aerosols – SOAA, SOAB;
- 2 fine and coarse PM – FPRM, CPRM.

A key factor in the present work is the appropriate choice of metrics, which evaluate the impact of air environment on quality of life and human health, respectively elaboration of software, which to calculate the introduced metrics on the basis of the atmospheric composition. An integral characteristic, which reflects the impact of the atmospheric composition on general population health and quality of life will be presented in this paper – the Air Quality Index (AQI).

4. Results

As mentioned above, a very extensive database was created from the numerical simulations and this data was used for different studies of the atmospheric composition, including the AQ climate.

The most simple and natural atmospheric composition evaluations are the surface concentrations, so by averaging over the whole simulated fields' ensemble the mean annual and seasonal surface concentrations can be obtained and treated like "typical" daily concentration patterns. The simulated ensemble is large enough to allow different statistical treatment. The probability density functions for each of the atmospheric compounds can be calculated for each grid point, or averaged over a chosen territory, with the respective seasonal and diurnal variations. Knowing the probability density functions means to know everything about the ensemble.

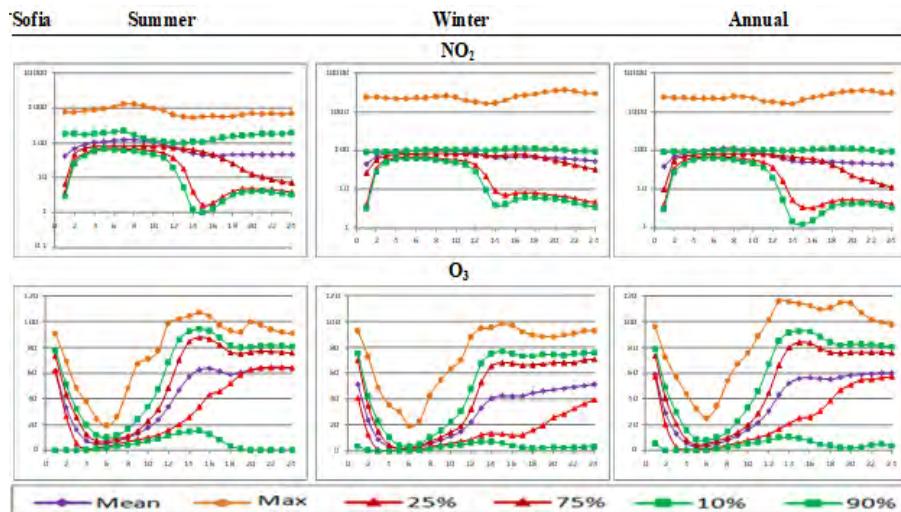


Fig. 2. Seasonal and diurnal variations of the "typical" surface concentrations for NO_2 and O_3 , averaged for the territory of the city of Sofia

In Fig. 2 the seasonal and diurnal variations of the "typical" surface concentrations for NO_2 and O_3 , averaged for the territory of the city of Sofia are presented. The curves in the graphics present the diurnal course of mean and maximal concentrations. The curves denoted by 25, 75, 10 and 90% show the imaginary concentrations for which the probability of the simulated ones to be smaller respectively than 25th, 75th, 10th and 90th percentiles of all. Thus the band 25-75 contains 50% and the band 10-90 contains 80% of the possible cases.

The diurnal variations of surface concentration fields are very well manifested.

Calculation of the Air Quality (AQ) impact on human health and quality of life. The AQ impact on human health and quality of life is an issue of great social significance. Evaluating this impact will give scientifically robust basis for elaborating efficient short term measures and long term strategies for mitigation of the harmful effects of air pollution on human health and quality of life. The AQ

impact on human health and quality of life is evaluated in the terms of AQ Indices (AQI), which give an integrated assessment of the impact of pollutants and directly measuring the effects of AQ on human health. In the current study the AQI evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ for Bulgaria and Sofia city carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data [16-19], which makes it possible to revile the climate of AQI spatial/temporal distribution and behaviour on the basis of air pollutant concentrations obtained from the numerical modelling. The index is defined in several segments, each of which is a linear function of the concentration of each pollutant considered: [20]. In that calculation the index falls in the ranges of a dimensionless scale. In each range index values are associated with an intuitive colour code, a linguistic description and a health description.

In different countries the indices are different and have their different scales. In Bulgaria the index, calculated in the frame of Bulgarian Chemical Weather Forecast System [21-23] and follows the UK Daily Air Quality Index [24]. This index has ten grades, which are further grouped into four bands: low, moderate, high and very high (Fig. 3). The index is based on the concentrations of five pollutants – Ozone, Nitrogen Dioxide, Sulphur Dioxide, Carbon Oxide and PM10. The breakpoints between index values are defined for each pollutant separately and the overall index is defined as the maximum value of the index.

Banding	Value	Health Descriptor
Low	1-3	Effects are unlikely to be noticed even by individuals who know they are sensitive to air pollutants
Moderate	4-6	Mild effects, unlikely to require action, may be noticed amongst sensitive individuals.
High	7-9	Significant effects may be noticed by sensitive individuals and action to avoid or reduce these effects may be needed (e.g. reducing exposure by spending less time in polluted areas outdoors). Asthmatics will find that their 'reliever' inhaler is likely to reverse the effects on the lung.
Very High	10	The effects on sensitive individuals described for 'High' levels of pollution may worsen.

Fig. 3. Air pollution bandings and Index impact on human health

Different averaging periods are used for different pollutants. The reference levels and Health Descriptor used in the tables are based on the health-protection related limit, target or guideline values set by the European regulations, at national or local level or by the World Health Organisation [25, 26].

Annually and seasonally averaged hourly values of the AQI for both domains with different horizontal grid resolution are presented in Fig. 4. The graphs represent the daily and seasonal percent recurrence of the AQI (1-10) over territory of Bulgaria and Sofia. These results, allow to follow which one of the indices has the highest recurrence through the day and during the seasons, and to analyze what are the possible reasons for high values of the index in High and Very High bands - meteorological conditions, dominant pollutants, and etc. Such a representation of the index makes it possible to evaluate the atmospheric composition in the context of impacts on human health and quality of life.

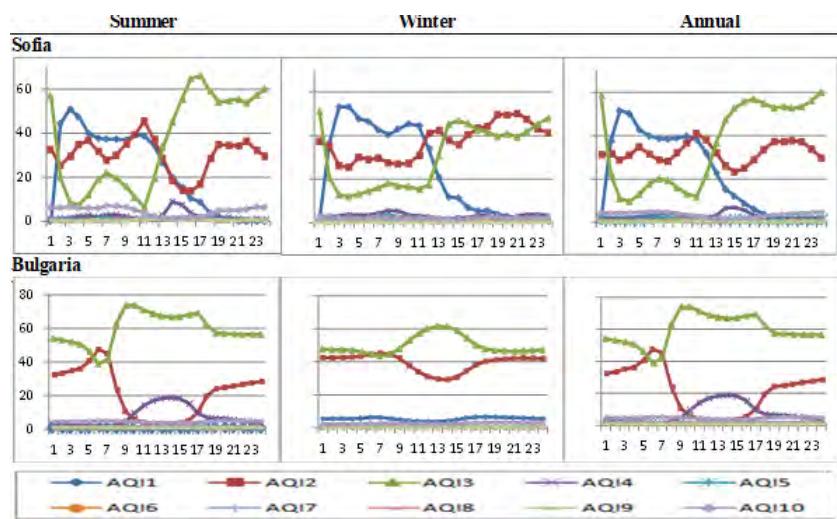


Fig. 4. Diurnal and seasonal variations (%) of the different AQI (1-10) integrated over territory of Bulgaria and Sofia

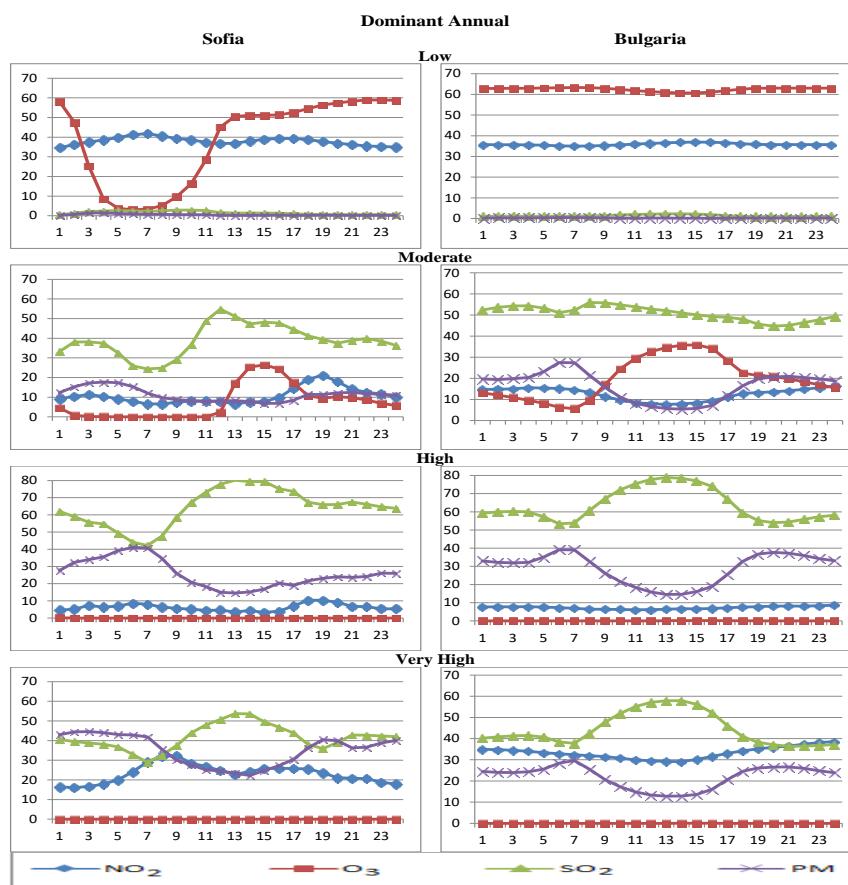


Fig. 5. Annual diurnal variations (%) of the dominant pollutant

The graphics that demonstrate the annual recurrence of the dominant pollutant (the pollutant with highest AQI, which determines the overall AQI) are presented in Fig. 5 for the four bands. The considered pollutants – NO₂, O₃, SO₂ and PM are presented in different colours. Of course the seasonal cases differ from the annually averaged graphics and the dominant pollutants are different for different band with well displayed seasonal and diurnal course.

Determining the contribution of different types of pollution sources to the AQ of the city of Sofia. The used emission inventory is made for a 10 emission categories (SNAP – Selected Nomenclature for sources of Air Pollution) and allows the evaluation of the contribution of various anthropogenic activities to the overall picture of air pollution:

1. SNAP 1 (Combustion in energy).
2. SNAP 2 (Non-industrial combustion plants).
3. SNAP 3 (Combustion in manufacturing industry).
4. Production processes.
5. Extraction and distribution of fossil fuels.
6. Solvent and other product use.
7. SNAP 7 (Road transport).
8. Other mobile sources and machinery.
9. Waste treatment and disposal.
10. Agriculture.

Six emission scenarios will be considered in the present paper: Simulations with all the emissions, with the emissions of SNAP categories 1 (energetic), 2 (non-industrial combustions), 3(industrial combustions) and 7 (road transport), and all the emissions for Sofia reduced by a factor of 0.8. This makes it possible to evaluate the contribution of road transport, energetic, industrial and non-industrial combustions to the atmospheric composition in the city. The concentrations for each scenario of reduced SNAP's were also calculated for each day of this 7-year period. The relative contribution of the emissions for each of the scenarios are calculated in the following way:

Let an arbitrary (concentration, deposition, columnar value, process contribution, etc.) pollution characteristic, for a given grid point, or averaged over chosen domain, obtained with all the emissions accounted for is denoted by φ . Let φ_m is the respective characteristic obtained when the emissions form source category m are reduced by a factor of α . In such a case the quantity

$$(1) \quad \phi_m = \frac{1}{1-\alpha} \cdot \frac{\varphi - \varphi_m}{\varphi} \cdot 100,$$

can be interpreted as the relative (in %) contributions of emission category m to the formation of the characteristic φ . It is obvious that more than one Selected Nomenclature for sources of Air Pollution (SNAP) category emissions can be reduced by a factor of α and so the joint contribution of several or all SNAP categories to the formation of the pollution characteristic φ can be evaluated.

Thus obtained relative source contributions can also be averaged for the whole ensemble, thus providing the “climate” of the emission contributions, in particular the “typical” annual and seasonal contributions.

For all the emission categories the pattern of the contribution fields is rather complex, which reflects the emission source configuration, the heterogeneity of topography, land use and meteorological conditions. Plots of this kind can give a good qualitative impression of the spatial complexity of the emission contribution. In order to demonstrate the emission contribution behavior in a more simple and easy to comprehend way, the respective fields can be averaged over some domain, which makes it possible to follow and compare the diurnal behavior of the respective contributions of different species.

Graphics of the diurnal evolution of the “typical” annual and seasonal relative contributions of the emissions from the already mentioned SNAP categories to the surface concentrations of NO₂, FPRM (Fine PaRticulate Matter) and CPRM (Coarse PaRticulate Matter) for the territory of Sofia city are shown in Fig. 6. The relative contributions for the territory of Sofia have well displayed diurnal and seasonal course.

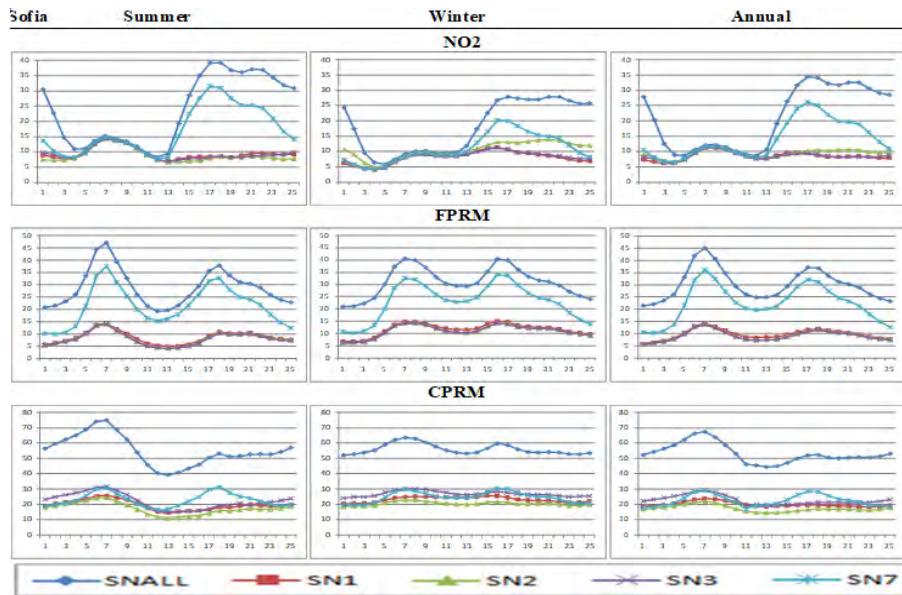


Fig. 6. Annually and seasonal averaged contribution of different SNAP categories (%) to the formation of NO₂, FPRM and CPRM for the territory of Sofia city

Determining the contribution of different processes to the surface concentration of pollutants. The Models-3 “Integrated Process Rate Analysis” option was applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution pattern formation. The procedure allows the concentration change for each compound for an hour ΔC to be presented as a sum of the contribution of the processes, which determine the concentration:

$$(2) \quad \Delta C = \sum_{i=1}^N \Delta c_i.$$

The outputs from the Integrated Process Rate Analysis were averaged over the 7-year ensemble and so the “typical” seasonal and annual evaluations were obtained.

An example of the diurnal/seasonal behavior of some of the processes contributing to the surface concentrations of the pollutant NO₂, FPRM and CPRM, averaged for the city of Sofia, is given in Fig. 7. The processes that were considered are: advection, diffusion, mass adjustment, emissions, dry deposition, chemistry, aerosol processes and cloud processes/aqueous chemistry.

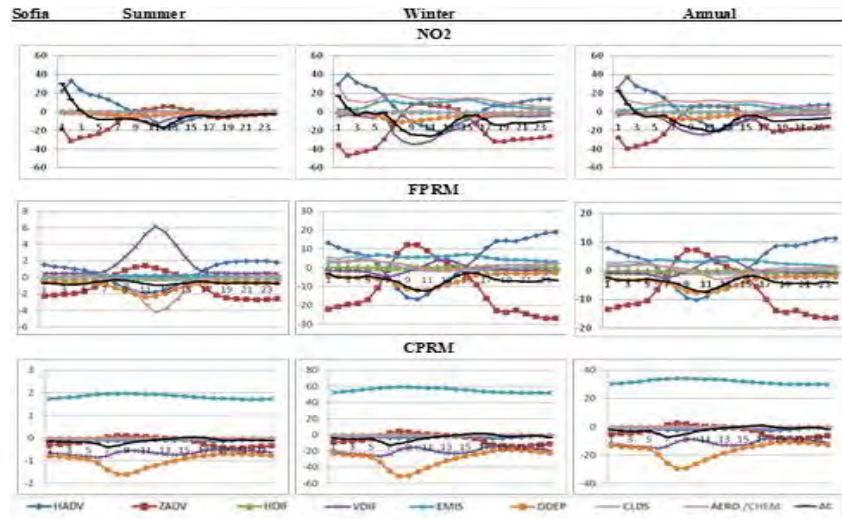


Fig. 7. Annually and seasonal averaged contribution of the different processes to the formation of NO₂, FPRM and CPRM ($\mu\text{g}/\text{m}^3$ per 1 h) for Sofia city

For the whole domain Sofia city, and for each of the selected items, the total concentration change (ΔC), leading to a change in a concentration is determined mainly by a small number of dominating processes which have large values, and could be with opposite sign and phases. The total concentration change (ΔC) is different for each pollutant and during the seasons. The sign of the contributions of some of the processes is obvious, but some of them may have different sign depending on the type of emissions, as well as weather conditions and topography.

5. Conclusion

A very small part of the obtained results is presented in the present paper, just to demonstrate the opportunity HPC platforms give for detailed and extensive study of the atmospheric composition – its behaviour, origin and health impact. Due to volume limitations the spatial variability of the air pollution characteristics is not demonstrated at all.

The generated ensembles of atmospheric composition characteristics have still to be carefully and extensively treated and analysed, which will be objective of the future work of the authors.

Deep gratitude is due to US EPA and US NCEP, EMEP and to the Netherlands Organization for Applied Scientific research (TNO) for providing free-of-charge data and software and the high-resolution European anthropogenic emission inventory.

Acknowledgements: The present work is supported by the Bulgarian National Science Fund (Grant ДЦВП-02/1/29.12.2009), EC-H2020 Project 675121(Project VI-SEEM), EC-7PPI Grant PIRSES-GA-2013-612671 (Project REQUA), EC-7PPI Grant 261 323 (Project EGI-INSPIRE), Program for Career Development of Young Scientists, BAS.

References

1. K o p a n a k i s, I., et al. Variability of Ozone in the Eastern Mediterranean During a 7-Year Study. – Air. Qual. Atmos. Health, Vol. **9**, 2015, pp. 461-470.
2. K a n a k i d o u, M., et al. Megacities as Hot Spots of Air Pollution in the East Mediterranean. – Atmospheric Environement, 2010.
3. L e l i e v e l d, J., et al. Global air Pollution Crossroads over the Mediterranean. – Science, Vol. **298**, 2002, pp. 794-799.
4. P o u p k o u, A., et al. Effects of Anthropogenic Emission Sources on Maximum Ozone Concentrations over Greece. – Atmospheric Research, Vol. **89**, 2008, pp. 374-381.
5. M a r é c a l, V., et al. A Regional Air Quality Forecasting System over Europe: The MACC-II Daily Ensemble Production. – Geosci. Model Dev., Vol. **8**, 2015, pp. 2777-2813.
6. S h a m a r o c k, W., J. K l e m p, J. D u d h i a, D. G i l l, D. B a r k e r, W. W a n g, J. P o w e r s. A Description of the Advanced Research WRF. Version 2. 2007.
http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
7. CEP Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System. University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina, 2003.
8. V i s s c h e d i j k, A., P. Z a n d v e l d, H. V a n d e r G o n. A High Resolution Gridded European Emission Database for the EU Integrated Project GEMS. TNO Report 2007-A-R0233/B, The Netherlands Brunekreef B, Holgate S: Air Pollution and Health. – Lancet 2002, Vol. **360**, 2007, pp. 1233-1242.
9. V e s t r e n g, V. Emission Data Reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the Spatial Distribution of Emissions. Meteorological Synthesizing Centre – West, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway, Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1/2001, 2001.
10. V e s t r e n g, V., K. B r e i v i k, M. A d a m s, A. W a g n e r, J. G o o d w i n, O. R o z o v s k a y a, J. M. P a c y n a. Inventory Review 2005, Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive, Technical Report MSC-W 1/2005, EMEP, 2005.
11. S c h w e d e, D., G. P o u l i o t, T. P i e r c e. Changes to the Biogenic Emissions Inventory System Version 3 (BEIS3). – In: Proc. of 4th Annual CMAS Models-3 Users's Conference, 26-28 September 2005, Chapel Hill, NC.
12. B y u n, D., et al. Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. – In: Proc. of 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, pp. 264-268.
13. B y u n, D., J. C h i n g. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. EPA Report 600/R-99/030, Washington, DC, 1999.
<http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>
14. CMAQ User Guide. 2006.
<https://www.cmascenter.org/help/documentation.cfm?model=cmaq&version=4.6>
15. T o d o r o v a, A., et al. Grid Computing for Atmospheric Composition Studies in Bulgaria. – Earth Science Informatics, Vol. **3**, 2010, No 4, pp. 259-282.
16. G a d z h e v, G., K. G a n e v, N. M i l o s h e v, D. S y r a k o v, M. P r o d a n o v a. Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria. – Computers and Mathematics with Applications, Vol. **65**, 2013, pp. 402-422.
17. G a d z h e v, G., K. G a n e v, M. P r o d a n o v a, D. S y r a k o v, E. A t a n a s o v, N. M i l o s h e v. Multi-Scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria. – NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security, Vol. **137**, 2013, pp. 381-385.
18. G a d z h e v, G., K. G a n e v, N. M i l o s h e v, D. S y r a k o v, M. P r o d a n o v a. Analysis of the Processes which Form the Air Pollution Pattern over Bulgaria. – In: I. Lirkov et al., Eds. LSSC 2013. LNCS 8353. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2014, pp. 390-396.

19. Gadjhev, G., K. Ganев, N. Miloshev, D. Syrakov, M. Prodanova. Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria – Grid Computing Simulations. – In: I. Lirkov et al., Eds. LSSC 2013, LNCS 8353, © Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014, pp. 484-490.
20. EPA. Technical Assistance Document for the Reporting of Daily Air Quality – the Air Quality Index (AQI). EPA-454/B-09-001, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina 27711, 2009.
21. Syrakov, D., I. Etopolska, M. Prodanova, K. Ganev, N. Miloshev, K. Slavov. Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria. – American Institute of Physics, Conf. Proc. 1487, 2012, pp. 88-94.
22. Syrakov, D., I. Etopolska, M. Prodanova, K. Slavov, K. Ganev, N. Miloshev, T. Ljubenov. Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria Region to Sofia City. American Institute of Physics, Conf. Proc. 1561, 2013, pp. 120-132.
23. Syrakov, D., M. Prodanova, I. Etopolska, K. Slavov, K. Ganev, N. Miloshev, T. Ljubenov. A Multy-Domain Operational Chemical Weather Forecast System. – In: I. Lirkov et al., Eds. LSSC 2013. LNCS 8353. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2014, pp. 413-420,
24. Leeuw, F. De, W. Mol. Air Quality and Air Quality Indices: A World Apart. ETC/ACC Technical Paper 2005/5, 2005.
http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACC_TechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf
25. Fact Sheet Number 187, World Health Organization (WHO), 2000.
26. Health Aspects of Air Pollution. Results from the WHO Project Systematic Review of Health Aspects of Air Pollution in Europe, World Health Organization (WHO), 2004.

Computer Simulations of Atmospheric Composition in Urban Areas. Some Results for the City of Sofia

Ivelina Georgieva^(✉), Georgi Gadzhev, Kostadin Ganev,
and Nikolay Miloshev

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography,
Bulgarian Academy of Sciences, Acad. G. Bonchev str., bl. 3, 1113 Sofia, Bulgaria
iivanova@geophys.bas.bg

Abstract. Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in the city of Sofia have been recently performed. An ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of Sofia—typical and extreme features of the special/temporal behavior, annual means and seasonal variations, etc. has been constructed. The simulations were carried out using the American Environment Protection Agency (US EPA) Models-3 system. As the National Centers for Environmental Prediction (NCEP) Global Analysis Data with 1 degree resolution was used as meteorological background, the system nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 1 km resolution over Sofia. The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions were taken from the Netherlands Organization for Applied Scientific research (TNO) inventory. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of Volatile Organic Compound (VOC) are estimated by the model Sparse Matrix Operator Kernel Emissions (SMOKE). The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal behavior could be interesting. Different characteristics of the numerically obtained concentration fields of pollutants as well as of determining the contribution of different types of pollutants and pollution sources will be demonstrated in the present paper.

Keywords: Atmospheric composition · Numerical modeling
Integrated process rate analysis
Ensemble of numerical simulation results

1 Introduction

The atmospheric composition in urban areas is one of the primary tasks in air pollution studies. The urban air pollution climate in Sofia have not been systematically studied yet, though, of course, some air pollution modeling for the

HARMO18

18TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON HARMONISATION WITHIN ATMOSPHERIC DISPERSION MODELLING FOR REGULATORY PURPOSES

PROCEEDINGS

9-12 October 2017

CNR Research Area
Bologna
Italy



National Research Council of Italy
Institute of Atmospheric Sciences
and Climate



ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA
DIPARTIMENTO DI FISICA E ASTRONOMIA



Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes

9-12 October 2017, Bologna, Italy

Proceedings

Edited by

**Silvana Di Sabatino^(a), Silvia Trini Castelli^(b),
Erika Brattich^(a)**

- (a) Department of Physics and Astronomy, Alma Mater Studiorum – University of Bologna, Bologna, Italy
- (b) Institute of Atmospheric Sciences and Climate, National Research Council, Torino seat, Torino, Italy

October 2017, Bologna, Italy

**18th International Conference on
Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
9-12 October 2017, Bologna, Italy**

**IMPACT OF THE AIR POLLUTION ON THE QUALITY OF LIFE AND HEALTH RISKS IN
BULGARIA**

Ivelina Georgieva¹ and Vladimir Ivanov¹

¹ National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography – Bulgarian Academy of Sciences, Sofia,
Bulgaria

Abstract: The air is the living environment of human beings and obviously the atmospheric composition has a great importance for the quality of life and human health. Air Quality (AQ) is a key element for the well-being and quality of life of European citizens.

The objectives of the present work is performing reliable, comprehensive and detailed studies of the impact of lower atmosphere composition on the quality of life and health risks for the population in Bulgaria.

The study of AQ is based on atmospheric composition numerical simulations. This is a fruitful approach, which will help better understanding of the part which different processes and transport scales play in Air Environment formation.

The Air Quality Index (AQI) provides an integrated assessment of the impact of air pollutants on human health and is calculated on the basis of the concentration of various pollutants obtained from measurements or numerical modelling.

The following set of models was applied as basic tool for 3D simulations - US EPA Models 3 System: WRF - PSU/NCAR 6-th generation meso-meteorological model; CMAQ – model of transport and chemical transformations. SMOKE – emission pre-processor. The models “nesting” abilities were utilized for downscaling the simulations to a 9 km resolution for Bulgaria.

The simulations were carried out for a 7 year period (2008 - 2014) thus providing quite a comprehensive ensemble of surface atmospheric composition fields, respectively AQI. The diurnal variations of the recurrence spatial distribution of different classes of the AQI are demonstrated and discussed in the present work.

Key words: air quality, ensemble of numerical simulation, air quality indices, quality of life, health risks

INTRODUCTION

The AQ is a key element for the well-being and quality of life of European citizens. An association between the increased incidence of respiratory, cardiovascular, neoplastic diseases, the reduced life expectancy and air pollution has been robustly established (Brunekreef B and Holgate S., 2002), (Atkinson et al., 2012). According to the World Health Organization (WHO, 2000, 2005), between 2.5 and 11% of the total number of annual deaths are due to air pollution. Current legislation (Directive 2002/3/2008 EC) requires informing the public on AQ, assessing air pollutant concentrations throughout the whole territory of Member States and indicating exceedances of limit and target values, forecasting potential exceedances and assessing possible emergency measures to abate exceedances using modelling tools.

The objective of the present study is calculation of the Air Quality (AQ) impact on human health and quality of life in Bulgaria. The AQ impact is evaluated in the terms of the Air Quality Indices (AQI), which give an integrated assessment of the impact of several pollutants and an integral characteristic directly measuring the effects on human health. In the current study the AQI evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ in Bulgaria, which makes it possible to reveal the climate of AQI spatial/ temporal distribution and behaviour, using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data.

METHODOLOGY

Air Quality Indices: The AQI provides an integrated assessment of the impact of the air pollution on human health and is based on the concentration of various pollutants obtained from measurements or

numerical modelling. One of the most commonly used indices is the UK Daily Air Quality Index (de Leeuw and Mol, 2005), also used in Bulgaria (Syrakov et al., 2012, 2013), (Georgieva, 2014), (Georgieva et al., 2015, 2017). This index has 10 points, grouped into 4 bands: Low, Moderate, High and Very High. Each band contains 3 indices (Table 1) except AQI 10 which defines the Very High band. The AQI is based on the concentrations of O₃, NO₂, SO₂, CO and PM₁₀. The breakpoints between index values are defined for each pollutant separately and the overall index is defined as the maximum value of all. Health descriptor for at-risk groups and the population are attached to each of the bands. The reference levels and Health Descriptor are based on health-protection related limit, target values set by the EU or by WHO.

Table 1: Air quality indices and their health impact (de Leeuw and Mol, 2005).

Banding	Value	Health Descriptor
Low	1–3	Effects are unlikely to be noticed even by individuals who know they are sensitive to air pollutants
Moderate	4–6	Mild effects, unlikely to require action, may be noticed amongst sensitive individuals.
High	7–9	Significant effects may be noticed by sensitive individuals and action to avoid or reduce these effects may be needed (e.g. reducing exposure by spending less time in polluted areas outdoors). Asthmatics will find that their 'reliever' inhaler is likely to reverse the effects on the lung.
Very High	10	The effects on sensitive individuals described for 'High' levels of pollution may worsen.

Air quality computer simulations: The AQI evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ in Bulgaria carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data (Gadzhev et al., 2011 a, b, 2012, 2013 a, b, 2014 a, b). All the simulations are based on the US EPA Model-3 system: **WRF** (Shamarock et al., 2007) used as meteorological pre-processor; **CMAQ** (Byun et al., 1998), (Byun and Ching, 1999), being the Chemical Transport Model (CTM) and **SMOKE** (CEP, 2003) – the emission pre-processor of the system.

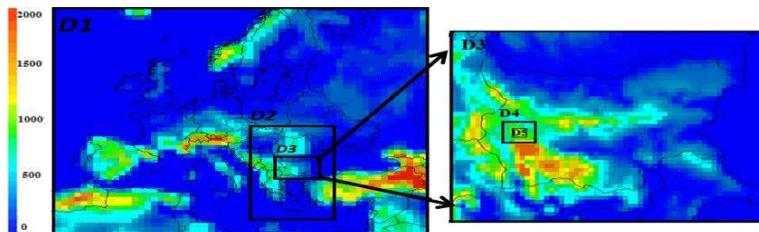


Figure 1. Model domains - D1-81x81 km (Europe), D2- 27x27 km (Balkan Peninsula), D3- 9x9 km (Bulgaria), D4-3x3 km (Sofia municipality) and D5- 1x1 km (Sofia city).

Meteorological data: The large scale (background) meteorological used is the NCEP Global Analysis Data with 1°×1° resolution. The WRF/CMAQ nesting capabilities are applied for downscale the simulations to a 9 km horizontal resolution for Bulgaria. The simulations are carried out for 5 nested domains (Figure 1), where the innermost domain is D5 - Sofia city (1km horizontal grid resolution) and some of the results for this domain are present in (Georgieva et al., 2015, 2017). The current paper presents results for the domain D3 - Bulgaria with 9 km horizontal grid resolution.

Emission data: The TNO high resolution inventory is exploited with resolution 0.25°×0.125° (about 20×15 km). The inventory is produced by proper disaggregation of the EMEP 50-km inventory data base (Vestreng, 2001), (Vestreng et al., 2005). The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria. The simulations are performed for 7 years (2008 to 2014). The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE. (Schwede et al., 2005), (Syrakov et al., 2013).

RESULTS

The simulations aimed at constructing of ensemble of daily simulations for a large period (2008 - 2014).

The results from the computer simulations are presented for the domain Bulgaria (9x9 km).

In the first place should be noted some areas from the territory of Bulgaria (Figure 2) for which the simulation results are discussed in the paper.

- | | |
|-----------------------|-----------------------|
| 1 - Sofia | 7 - Rila mountain |
| 2 - Rozhen | 8 - Pirin mountain |
| 3 - Stara Zagora | 9 - Rodopy mountain |
| 4 - Varna | 10 - Balkan Mountain |
| 5 - TPP Bobov dol | 11 - Vitosha mountain |
| 6 - TPP Maritza Iztok | |

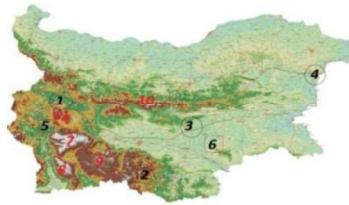


Figure 2: Location of some remarkable points: 1-Sofia the capital of Bulgaria, 2 - Rozhen presents the mountain area in the Rila-Rhodope mountain array, 3 - Stara Zagora is the 5th largest city in Bulgaria, placed near to Thermal Power Plant (TPP) Maritza Iztok, 4 - Varna is situated on the coast line of the Black Sea, 5 - TPP Bobov dol and 6 - TPP Maritza Iztok., 7-10 - Bulgarian mountains (Rila, Pirin, Rodophy, Balkan and Vitosha).

Percent recurrence of the AQI in the “Low”, “Moderate”, “High” and “Very High” bands over territory of Bulgaria: Figures 3 demonstrate the spatial and diurnal variation of the annual recurrence of different AQI categories for chosen hour at noon - 13:00 GMT. The picture shows the sum of recurrences of the AQI in each range - Low, Moderate and High range. In the Low range the air is most clean, so high recurrence values mean more cases with clean air and lower recurrence values mean less cases with clean air (worse AQ status). In the other 3 plots (Moderate, High and Very High ranges) - high recurrence values means less favourable and respectively bad AQ status.

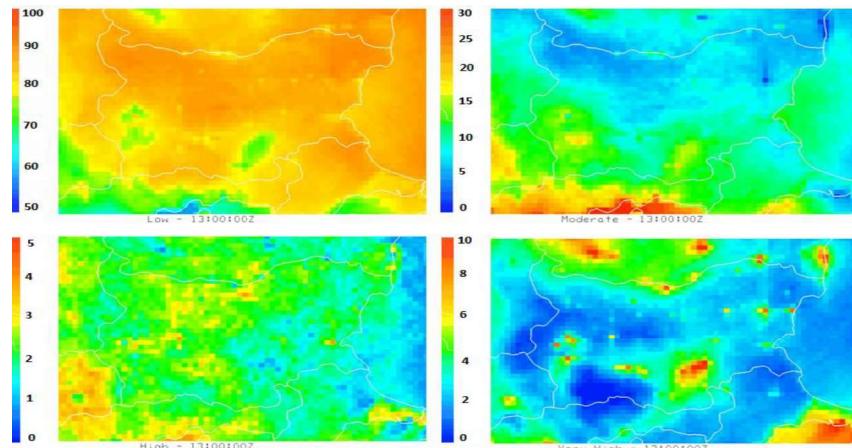


Figure 3. Annual plots of the recurrence [%] of the AQI - Low, Moderate, High and Very High bands in Bulgaria.

In that map of the Low range (upper left) recurrence it can be seen that Sofia and the Power plants (Maritza Iztok and Bobov dol) are the places with most polluted air with about 70% recurrence. Also it can be seen that in the regions over the highest part of the mountains mostly near Rozhen the Moderate range AQI (upper right) recurrence is pretty high. This is due to the high ozone concentrations and the ozone pollution there. The ozone in Bulgaria is to a great extend due to transport from abroad (Gadzhev et al., 2012, 2013 a, b). This is one of the reasons, together with the ozone photochemistry reactions, why the ozone concentrations early in the morning are smaller than at noon (less intensive transport from higher levels). In this range the lowest AQI status is near Sofia and Stara Zagora, TPP Maritza Iztok. For the High band (bottom left) the recurrences are not so high, about 3-5% mostly in the biggest cities. In Very High range (bottom right) recurrences during the whole day also biggest cities and power plants are well displayed. The maximum values are at night and this is probably due to the weather conditions (atmospheric stability) and Power Plants/domestic heating working regime. Of course this picture presents only the annual cases and the results are different for different seasons.

Annually averaged diurnal variations [%] of the dominant pollutant: The graphics that demonstrate the annual recurrence of the dominant pollutant are present in Figure 4 for the 4 bands. The considered pollutants - NO_2 , O_3 , SO_2 and PM are present in different colours. The pollutants that dominate (determine the AQI) in the Low range are O_3 and NO_2 . In Moderate range dominates SO_2 followed by the O_3 . In the High range dominates primarily SO_2 followed by PM concentrations, but for Very High range

except SO₂ the second dominant pollutants are NO₂ and PM. Of course here again the seasonal cases differ from the annually averaged graphics and the dominant pollutants are different for different band with well displayed seasonal and diurnal course.

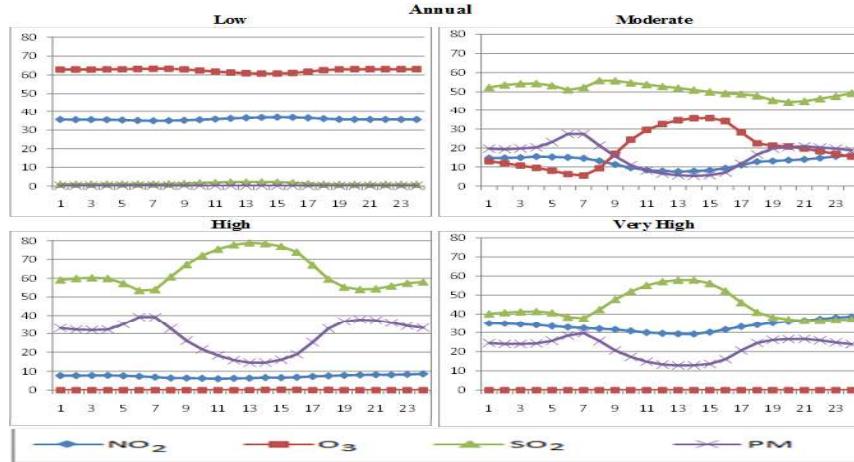


Figure 4. Annual Diurnal variations [%] of the dominant pollutant.

CONCLUSIONS

The general conclusion that can be made is that the AQ status of Bulgaria is rather good (evaluated with a spatial resolution of 9 km). AQI falls mostly in Low and Moderate bands. The recurrence of cases with Very High pollution is almost 15% mostly at TPPs and biggest city in the country. Apart from general features the climatic behaviour of the AQI probabilities is rather complex with significant spatial, seasonal and diurnal variability. The areas with slightly worse AQ status are not necessarily linked with the big pollution sources. Wide rural and even mountain regions can also have significant probability for AQI from the Moderate range. The recurrence of the AQI from the High range is almost negligible, except for some small areas linked mostly to the TPPs in the cold periods of the year. The dominant pollutants that determined the AQI and AQ status in Bulgaria are different for different bands with well displayed seasonal and diurnal course. In general we can say that: In Low range dominate O₃ and NO₂; In Moderate range dominate O₃ and SO₂; for the High and Very High range dominates SO₂, except in cold months, where dominates NO₂.

ACKNOWLEDGEMENTS

The present work is supported by the projects Bulgarian National Science Fund (grant DN-04/2/13.12.2016), H2020 grant 675121 (project VI-SEEM) and 7 FP grant PIRSES-GA-2013-612671 (project REQUA).

Deep gratitude to the organizations and institutes (NCEP-NCAR, EMEP and TNO) for providing free-of-charge data and soft-ware and the high-resolution European anthropogenic emission inventory).

REFERENCES

- Atkinson, R W, Yu D, Armstrong B, Pattenden S, Wilkinson P, Doherty R, Hea MR, Anderson HR., 2012; *Concentration–Response Function for Ozone and Daily Mortality: Results from Five Urban and Five Rural U.K. Populations*, Environ Health Perspect, 120:1411–1417
- Brunekreef B, Holgate S, 2002: *Air pollution and health.*, Lancet 360:1233-1242
- Byun, D., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F.S. Binkowski, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, and C. Jang, 1998: *Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality*
- Byun, D., Ching, J., 1999: *Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System*. EPA Report 600/R-99/030, Washington DC. <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- CEP, 2003: *Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System*, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina.

- De Leeuw, F., Mol, W., 2005: *Air Quality and Air Quality Indices: a world apart*. ETC/ACC Technical Paper 2005/5 http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACC_TechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf
- European Parliament , 2002: *Directive 2002/3/EC of 12 February 2002 relating to ozone in ambient air*, Official Journal of the European Communities (9.3.2002) L 67: 14-30.
- Gadzhev, G., Syrakov, D., Ganev, K., Brandiyska, A., Miloshev, N., Georgiev, G., Prodanova, M., 2011: *Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria. Study of the Contribution of Biogenic Emissions*, AIP Conf. Proc. 1404, 200, p.200-209.
- Gadzhev, G. Jordanov, G. Ganev, K. Prodanova, M. Syrakov, D. Miloshev N. 2011b: *Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region*, Lecture Notes in Computer Sciences, Dimov, I. S. Dimova, and N. Kolkovska (Eds.): LNCS 6046, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, p.150-157.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Syrakov, D., Miloshev, N., Prodanova, M., 2012: *Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria*, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 50, Nos. 1/2/3/4, 2012, p. 130-139.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., 2013a: *Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria*, Computers and Mathematics with Applications 65, p. 402-422.
- Gadzhev G., K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev, 2013b: Some statistical evaluations of numerically obtained atmospheric composition fields in Bulgaria, Proceedings of the 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes,
- Gadzhev G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, and M. Prodanova, 2014a: *Analysis of the Processes Which Form the Air Pollution Pattern over Bulgaria*, in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, pp. 390–396, © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014
- Gadzhev G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, and M. Prodanova, 2014b: *Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria – Grid Computing Simulations*, in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, pp. 484–490, , © Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014.
- Georgieva, I., 2014: *Study of the air quality index climate for Bulgaria*, Proc. of the international conference on numerical methods for scientific computations and advanced applications, May 19-22, 2014, Bansko, p. 39-42.
- Georgieva I., G.Gadzhev, K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev, 2015: *Numerical study of the air quality in the city of Sofia – some preliminary results*, International Journal of Environment and pollution, Vol. 57, Nos. 3/4, 162-174.
- Georgieva I and Ivanov V., 2017: Air Quality Index Evaluations for Sofia city Proc. of the 17th IEEE International Conference on Smart Technologies IEEE EUROCON 2017, 6 - 8 July 2017 920-925,
- Shamarock et al., 2007: *A description of the Advanced Research WRF Version 2*, http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
- Schwede, D., G. Pouliot, and T. Pierce, 2005: *Changes to the Biogenic Emissions Inventory System Version 3 (BEIS3)*, Proc. of 4th Annual CMAS Models-3 Users's Conference, September 26-28, 2005, Chapel Hill, NC.
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Ganev, K., Miloshev, N., Slavov, K., 2012: *Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria*, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1487, p. 88 - 94;
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., 2013: *Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to Sofia city*, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1561, p. 120-132,
- Vestreng V., 2001: *Emission data reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the spatial distribution of emissions*. Meteorological Synthesizing Centre - West, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway, Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1/2001.
- Vestreng V., K. Breivik, M. Adams, A. Wagner, J. Goodwin, O. Rozovskaya, J.M. Pacyna, 2005: *Inventory Review 2005 (Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive)*, Technical Report MSC-W 1/2005, EMEP
- WHO, 2000: Fact Sheet Number 187, World Health Organization,
- WHO, 2005: *Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulphur dioxide*. Global Update. Summary of risk assessment, WHO Regional Office for Europe, Copenhagen;

HARMO18

18TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON HARMONISATION WITHIN ATMOSPHERIC DISPERSION MODELLING FOR REGULATORY PURPOSES

PROCEEDINGS

9-12 October 2017

CNR Research Area
Bologna
Italy



National Research Council of Italy
Institute of Atmospheric Sciences
and Climate



ALMA MATER STUDIORUM
UNIVERSITÀ DI BOLOGNA
DIPARTIMENTO DI FISICA E ASTRONOMIA



Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes

9-12 October 2017, Bologna, Italy

Proceedings

Edited by

**Silvana Di Sabatino^(a), Silvia Trini Castelli^(b),
Erika Brattich^(a)**

- (a) Department of Physics and Astronomy, Alma Mater Studiorum – University of Bologna, Bologna, Italy
- (b) Institute of Atmospheric Sciences and Climate, National Research Council, Torino seat, Torino, Italy

October 2017, Bologna, Italy

**18th International Conference on
Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
9-12 October 2017, Bologna, Italy**

**CONTRIBUTION OF DIFFERENT EMISSION SOURCES TO THE ATMOSPHERIC
COMPOSITION FORMATION IN CITY OF SOFIA**

Georgi Gadzhev¹, Ivelina Georgieva¹, Kostadin Ganев¹ and Nikolay Miloshev¹

¹ National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography – Bulgarian Academy of Sciences, Sofia,
Bulgaria; "Akad. G. Bonchev" 3. str

Abstract:

Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in the city of Sofia have been recently performed and an ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of Sofia – typical and extreme features of the special/temporal behaviour, annual means and seasonal variations, etc. has been constructed.

The US EPA Models-3 system (WRF, CMAQ, SMOKE) is chosen as a modeling tool. As the NCEP Global Analysis Data with 1 degree resolution is used as meteorological background, the system nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 1 km resolution over Sofia. The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions were taken from the TNO inventory. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE.

The present work aims at studying the contribution of different emission sources to the atmospheric composition formation in the region.

The study is based on a large number of numerical simulations carried out day by day for years 2008-2014 and 5 emission scenarios – with all the emissions (SNAP_ALL), with the emissions from energetics (SNAP_01), emissions from non-industrial (SNAP_02) and industrial combustions (SNAP_03) and road transport (SNAP_07) excluded. Results from the numerical simulations concerning the contribution of the different emission categories are demonstrated in the paper.

Key words: urban air pollution, computer simulations, SNAP categories, contribution of different emission sources

INTRODUCTION

The atmospheric composition in urban areas is one of the primary tasks in air pollution studies. The seasonal air pollution climate in urban areas have not been systematically studied yet, but some air pollution modeling for the city of Sofia had been performed and even air pollution forecast for the city is operationally going on (Syrakov et al., 2012), (Georgieva, 2014) and (Georgieva et al., 2015). Recently extensive studies for long enough simulation periods and good resolution of the atmospheric composition status in Bulgaria have been carried out using up-to-date modeling tools and detailed and reliable input data (Gadzhev et al., 2011a, b), but next step in studying the atmospheric composition climate is performing simulations in urban scale. The simulations aim at constructing of ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of the city of Sofia – typical and extreme features of the special/temporal behaviour, annual means, seasonal variations, etc. Some evaluations of the the contribution of different pollution sources to the atmospheric composition of the city of Sofia will be presented in the present paper.

METHODOLOGY

The simulations were carried out using the US EPA Models-3 system: WRF (Shamarock et al., 2007) used as meteorological pre-processor, CMAQ - the Community Multiscale Air Quality System (Byun, 1998), (Byun and Ching, 1999), being the Chemical Transport Model (CTM) of the system, and SMOKE - the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System (CEP, 2003) – the emission pre-processor of Models-3 system.

The large scale (background) meteorological data used is the NCEP Global Analysis Data with $1^\circ \times 1^\circ$ resolution. WRF and CMAQ nesting capabilities are applied for downscaling the simulations to a 1 km step for the innermost domain (Sofia). The national emission inventory is used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions are taken from the TNO inventory (Vestreng, 2001), (Vestreng et al., 2005) and (Visschedijk et al., 2007). The simulations are performed for 7 years (2008 to 2014) with Two-Way Nesting mod on. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions. The biogenic emissions of VOC are estimated by the model SMOKE (Schwede et al., 2015), (Gadzhev et al., 2012), (Syrakov et al., 2013) and (Georgieva and Ivanov, 2017).

RESULTS

Six emission scenarios will be considered in the present paper: Simulations with all the emissions and with the emissions from all the SNAP categories (SNALL), SNAP categories 1 (energetic – SN1), 2 (non-industrial combustions 2– SN2), 3 (industrial combustions – SN3) and 7 (road transport – SN7) for Sofia reduced by a factor of 0.8. This makes it possible to evaluate the contribution of all the emissions, as well as the emissions from road transport, energetic, industrial and non-industrial combustions to the atmospheric composition in the city. The relative contribution of the emissions for each scenario was calculated for each day of this 7 year period and then by averaging over the ensemble, the typical fields of relative contributions of these emissions for each of the compound surface concentrations were calculated for the 4 seasons and annually. Some illustrations of the emission impact evaluations will be given in the present paper.

Plots of some of these typical seasonal (summer and winter) surface relative contribution of SN7 to the formation of pollutants NO_2 , O_3 and FPRM (12:00 GMT) are presented in Figure 1. The spatial and seasonal variability in NO_2 , O_3 and FPRM emission contribution fields is very well manifested.

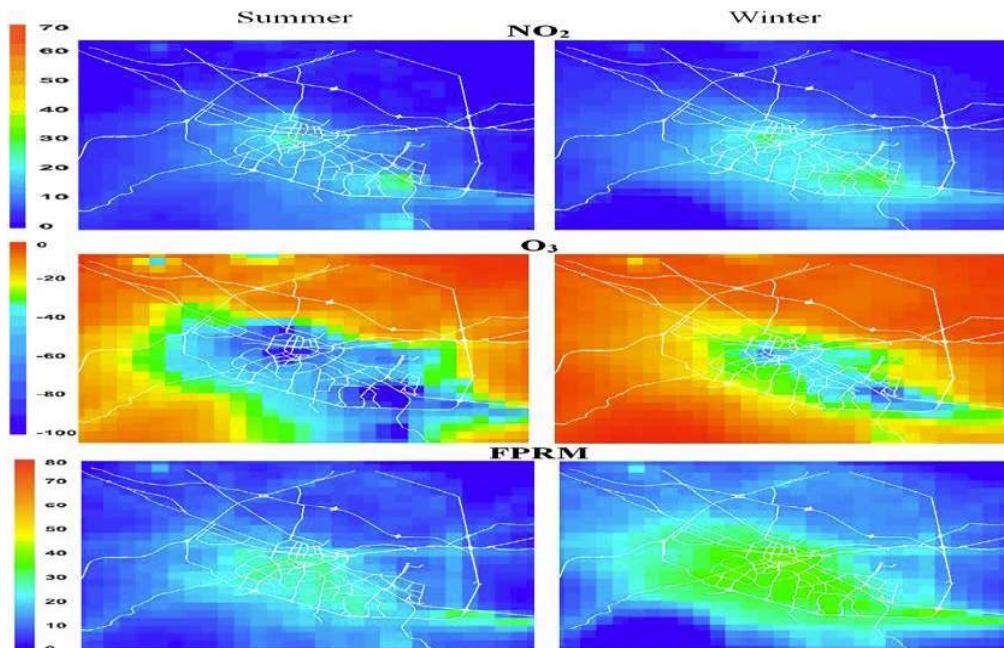


Figure 1. Seasonal (summer and winter) surface relative contribution of the emissions from SN7 to the formation of surface NO_2 , O_3 and FPRM [%] at 12:00 GMT

The average summer and winter contribution of the emissions from SN7 to the formation of NO_2 is positive. The places with high relative contribution are mainly in the city centre and road network.

On the plots for the average summer and winter contribution of the emissions from SN7 to the formation of Ozone it can be seen that the contribution is strictly negative, and the places with high negative values are the same as NO₂ maximums. That is not so strange having in mind the role of NO₂ in the O₃photochemistry and also that the ozone in Bulgaria is to a great extent due to transport from abroad (Gadzhev et al., 2013a, b, c and 2014)

The surface FPRM relative contributions are positive and bigger during the winter months than in summer and are larger in the city centre and over the most busy roads (places with most intensive road transport). For both NO₂ and FPRM the SN 7 emission contributions are larger for the winter. The main reason is probably the atmosphere stability and hampered transport of pollutants aloft.

For all the emission categories the pattern of the contribution fields is rather complex, which reflects the emission source configuration, the heterogeneity of topography, land use and meteorological conditions.

Plots of this kind can give a good qualitative impression of the spatial complexity of the emission contribution. In order to demonstrate the emission contribution behaviour in a more simple and easy to comprehend way, the respective fields can be averaged over some domain, which makes it possible to follow and compare the diurnal behaviour of the respective contributions for different species. Graphics of the diurnal evolution of the “typical” relative contribution of summer and winter emissions of SNAP categories 1, 2, 3, 7 and all the emissions to the surface concentrations of NO₂, FPRM and CPRM, averaged for the territory of Sofia city, are shown in Figure 2.

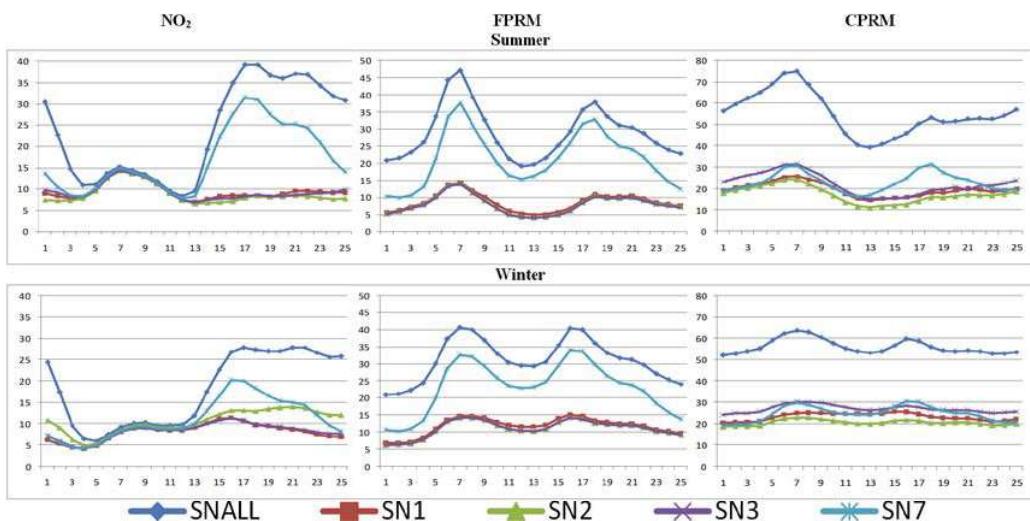


Figure 2. Seasonal (summer and winter) averaged relative contribution of all the emissions and the emissions from different SNAP categories [%] to the formation of NO₂, FPRM and CPRM for Sofia

In first place it should be noted that the contributions of the emissions from all the SNAP's to the formation of surface concentrations of NO₂, FPRM and CPRM are positive. Quite natural the relative contribution of all the emissions is the biggest. Generally all the contributions for all the compounds have well displayed seasonal and diurnal course. It should be noted that for a given season the contributions from different SNAP categories are different, but have qualitatively quite similar diurnal course in spite that the emissions from the different SNAP categories have different diurnal courses. This means that the main factor, which determines the emission contributions are the meteorological conditions. Yet some pics in the contribution of the emissions from SN7 during the hours with most busy road traffic can be observed.

From the plots for the summer and winter contributions of the different sources that lead to the formation of surface NO₂ in Sofia it could be seen that the dominant emissions are mostly from SN7. Exception

could be seen in the winter for NO₂ plots during the night time when the contribution of SN2 is bigger than SN7.

From the plots for the summer and winter contributions of the different sources that lead to the formation of surface FPRM, it can be seen that the emissions from SN7 are strictly dominant (up to about 30%). The diurnal distribution shows that for all the SNAPs there local maximums of the contribution in the morning and afternoon, and minimum around noon and during the night.

In the case of surface CPRM it can be seen that there is not a clearly dominant SNAP category, except for the afternoon hours in summer, when the contribution of SN7 emissions rises to 30% and becomes significantly larger than the contribution of the other SNAP categories, but generally the emissions from SN3 have the biggest contribution. The smallest contributions have the emissions from energetic and non-industrial combustion - about 20% each.

The contribution of emissions from all categories (SNALL) is less than 100%, which means that part of the concentrations are formed from sources external to the domain and are result of transport from outside the Sofia city.

CONCLUSION

The results, presented in the paper are just a first glance on the atmospheric composition status in urban areas, so very few decisive conclusions can be made at this stage of the study. Nevertheless, some of the major findings so far will be listed below:

- Different emissions relative contribution to the concentration of different species could be rather different, varying from almost 80% to several %. The contributions of different emission categories to different species surface concentrations have different diurnal course.
- For all of the pollutants the contribution of SNALL is dominant, but this contribution of emissions is less than 100%, which means that part of the concentrations are formed from sources outside the Sofia city, due to transport into the domain.
- The contribution of emissions of all SNAPs to ozone levels in Sofia is rather small and strictly negative. This is probably due to the fact that the NO_x concentrations are relatively small and they are the limitation factor for ozone formation. That means that the surface O₃ in Sofia mostly originates from outside the city.
- The contribution of all SN7 (road transport) to NO₂ surface concentrations is positive and reaches 50% around the most busy traffic roads. The SN7 emissions have dominant contributions to the NO₂ and FPRM surface concentrations.
- Dominant contribution to the surface CPRM concentrations have emissions of SNAP7 (road transport) and SNAP3 (industrial combustions).

ACKNOWLEDGMENT

Deep gratitude is due to the organizations and institutes (NCEP-NCAR, Unidata, MPI-M, EMEP and to the Netherlands Organization for Applied Scientific research (TNO)) for providing free-of-charge data and software and the high-resolution European anthropogenic emission inventory and all others.

The present work is supported by:

The Bulgarian National Science Fund (grant DN-04/2/13.12.2016).

EU – H2020 project 675121 (project VI-SEEM).

EU – 7PII grant PIRSES-GA-2013-612671 (project REQUA).

Program for career development of young scientists, BAS

REFERENCES

- Byun, D., 1998: Dynamically Consistent Formulation in Meteorological and Air Quality Models for Multi-scale Atmospheric Studies, *J. Atm.Sci.*, in review.
- Byun, D., and J.K.S. Ching, 1999: Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, United States Environmental Protection Agency, Office of Research and Development, Washington, DC 20460, EPA-600/R-99/030.

- CEP, 2003: Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina.
- Gadzhev G., G. Jordanov, K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev, 2011a: Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region, *Lecture Notes in Computer Sciences, LNCS 6046, c. Springer-Verlag Berlin Heidelberg*, 150-157.
- Gadzhev, G., Syrakov, D., Ganev, K., Brandiyska, A., Miloshev, N., Georgiev, G., Prodanova, M., 2011b: Atmospheric composition of the Balkan region and Bulgaria. Study of the contribution of biogenic emissions, *AIP Conference Proceedings*, **1404**, 200-209.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Syrakov, D., Miloshev, N., Prodanova, M., 2012: Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria, *Int. J. Environment and Pollution*, **Vol. 50**, Nos. 1/2/3/4, 2012, 130-139.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., 2013a: Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, *Comp. and Mathematics with Applications*, **65**, 402-422.
- Gadzhev G., K. Ganev, D. Syrakov, M. Prodanova and N. Miloshev, 2013b: Some Statistical Evaluations of Numerically Obtained Atmospheric Composition Fields in Bulgaria, *Proc. of 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*. 6-9 May 2013, Madrid, Spain, 373-377.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Atanasov, E., Miloshev, N., 2013c: Multi-scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria, *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security*, **137**, 381-385.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., 2014: Calculation Of Some Ozone Pollution Indeices For Bulgaria, *Ecology and Safety*, **Vol. 8**, ISSN 1314-7234, pp: 384- 392
- Georgieva, I., 2014: Study of the air quality index climate for Bulgaria, *Proc. of the international conference on numerical methods for scientific computations and advanced applications*, May 19-22, 2014, Bansko, ISBN978-954-91700-7-8, p. 39-42.
- Georgieva I., G.Gadzhev, K. Ganev, M. Prodanova, D. Syrakov, N. Miloshev, 2015: Numerical study of the air quality in the city of Sofia – some preliminary results, *International Journal of Environment and pollution*, Vol. **57**, Nos. 3/4, 162-174.
- Georgieva I and Ivanov V., 2017: Air Quality Index Evaluations for Sofia city *Proc. of the 17th IEEE International Conf. on Smart Technologies IEEE EUROCON 2017*, 6 - 8 July 2017, 920-925
- Shamarock et al., 2007: A description of the Advanced Research WRF Version 2.
- Schwede, D., G. Pouliot, and T. Pierce, 2005: Changes to the Biogenic Emissions Inventory System Version 3 (BEIS3), *Proc. of 4th Annual CMAS Models-3 Users's Conference*, September 26-28, 2005, Chapel Hill, NC.
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Ganev, K., Miloshev, N., Slavov, K., 2012: Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria, *American Institute of Physics*, Conf. Proc. 1487, p. 88 - 94
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., 2013: Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to Sofia city, *American Institute of Physics*, Conf. Proc. **1561**, 120-132.
- Vestreng V., 2001: Emission data reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the spatial distribution of emissions. Meteorological Synthesizing Centre - West, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway, Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1/2001.
- Vestreng V., K. Breivik, M. Adams, A. Wagner, J. Goodwin, O. Rozovskaya, J.M. Pacyna, 2005: Inventory Review 2005 (Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive), Technical Report MSC-W 1/2005, EMEP.
- Visschedijk A. J. H., P.Y.J. Zandveld and H.A.C. Denier van der Gon, 2007: A High Resolution Gridded European Emission Database for the EU Integrate Project GEMS, TNO-report 2007-A-R0233/B, Apeldoorn, The Netherlands.

Computer simulations of the impact of air pollution on the quality of life and health risks in Bulgaria

Ivelina Georgieva* and Vladimir Ivanov

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography,
Bulgarian Academy of Sciences,
Acad. G. Bonchev str. bl. 3, Sofia 1113, Bulgaria
Email: iivanova@geophys.bas.bg
Email: vivanov@geophys.bas.bg

*Corresponding author

Abstract: The air is the living environment of human beings and atmospheric composition has a great importance for the quality of life and human health. Air quality (AQ) is a key element for the well-being and quality of life of European citizens. The objective of the present work is performing reliable, comprehensive and detailed studies of the impact of lower atmosphere composition on quality of life for the population in Bulgaria. The AQ study is based on atmospheric composition numerical simulations. United States Environmental Protection Agency (US EPA) Models-3 system was applied as the tool for 3D simulations. The AQ index (AQI) provides an integrated assessment of the impact of air pollutants on human health and is calculated on the basis of the air pollutant concentration obtained from numerical modelling. A comprehensive ensemble of atmospheric composition fields was created and diurnal variations of the recurrence spatial distribution of different classes of the AQI are demonstrated in the present work.

Keywords: air quality; ensemble of numerical simulation; air quality indices; quality of life; health risks.

Reference to this paper should be made as follows: Georgieva, I. and Ivanov, V. (2018) 'Computer simulations of the impact of air pollution on the quality of life and health risks in Bulgaria', *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 64, Nos. 1/3, pp.35–46.

Biographical notes: Ivelina Georgieva graduated with a PhD at the National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences in 2017. Currently, she is a Chief Assistant at the Department of 'Geophysics' at the National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences. Her research activities are mainly in the fields of air pollution transport modelling, planetary boundary layer and meso-scale flow systems, air quality, quality of life and health risk.

Vladimir Ivanov is a Chief Assistant at the National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences since 2016. He graduated with a PhD at the Sofia University St. Kliment Ohridski, Faculty of Physics in 2015. His research activities are mainly in the fields of climate modelling and statistics.

This paper is a revised and expanded version of a paper entitled 'Impact of the air pollution on the quality of life and health risks in Bulgaria' presented at 18th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Bologna, Italy, 9–12 October 2017.

Contribution of different emission sources to the atmospheric composition formation in the city of Sofia

Georgi Gadzhev*, Ivelina Georgieva,
Kostadin Ganev and Nikolay Miloshev

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography,
Bulgarian Academy of Sciences,

Acad. G. Boncev str. bl. 3, Sofia 1113, Bulgaria

Email: ggadzhev@geophys.bas.bg

Email: iivanova@geophys.bas.bg

Email: kganев@geophys.bas.bg

Email: miloshev@geophys.bas.bg

*Corresponding author

Abstract: Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Sofia city have been recently performed and an ensemble, comprehensive enough to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate has been constructed. The US EPA Models-3 system was chosen as a modelling tool. As the NCEP Global Analysis Data with one degree resolution is used as meteorological background, the system nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 1 km resolution. The national emission inventory and the TNO inventory were used as an emission input. The study is based on a large number of numerical simulations carried out day by day for years 2008–2014 for six emission scenarios – with all the emissions included and with reduced: all the emissions, emissions from energetics, from non-industrial, industrial combustions and road transport. Results concerning the contribution of the different emission categories are demonstrated in the paper.

Keywords: urban air pollution; computer simulations; SNAP categories; contribution of different emission sources.

Reference to this paper should be made as follows: Gadzhev, G., Georgieva, I., Ganev, K. and Miloshev, N. (2018) ‘Contribution of different emission sources to the atmospheric composition formation in the city of Sofia’, *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 64, Nos. 1/3, pp.47–57.

Biographical notes: Georgi Gadzhev is a PhD and Associate Professor at the National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences in 2013. His research activities are mainly in the fields of air pollution transport modelling, planetary boundary layer and mesoscale flow systems.

Ivelina Georgieva graduated with a PhD at the National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences in 2017. Currently, she is a Chief Assistant at the Department of ‘Geophysics’ at the National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy



CLIMATE APPLICATIONS IN A VIRTUAL RESEARCH ENVIRONMENT PLATFORM

GEORGI GADZHEV*, IVELINA GEORGIEVA*, KOSTADIN GANEV*, VLADIMIR IVANOV*, NIKOLAY MILOSHEV*,
HRISTO CHERVENKOV† AND DIMITER SYRAKOV†

Abstract. Previous atmospheric composition studies were based on extensive computer simulations carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data.

The oncoming climate changes will exert influence on the ecosystems, on the all branches of the international economy, and on the quality of life. Regional climate models (RCMs) are important instruments used for downscaling climate simulations from Global circulation models (GCMs).

The air quality (AQ) impact on human health and quality of life is an issue of great social significance. Evaluating this impact will give scientifically robust basis for elaborating efficient short term measures and long term strategies for mitigation of the harmful effects of air pollution. The AQ impact is evaluated in the terms of Air Quality Indices (AQI). Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Bulgaria and Sofia have been recently performed. A quite extensive data base was created from simulations which were used for different studies of the atmospheric composition, including the AQ climate.

Main aims of the numerical experiment presented in this paper are: (1) Adaptation and tuning of the RegCM model for the Balkan Peninsula and Bulgaria and thus development of a methodology able to predict possible changes of the regional climate for different global climate change scenarios and their impact on spatial/temporal distribution of precipitation, hence the global water budgets, to changes of the characteristics and spatial/temporal distribution of extreme, unfavorable and catastrophic events (drought, storms, hail, floods, fires, sea waves, soil erosion, etc.). (2) Development of a methodology and performing reliable, comprehensive and detailed studies of the impact of lower atmosphere parameters and characteristics on the quality of life (QL) and health risks (HR) for the population.

Key words: Virtual Research Environment, Regional climate models, RegCM, Air Quality Indices

AMS subject classifications. 86A10, 65Y05

1. Introduction. The climate modelling community has very strong computational needs. In particular, the integration of various computational resources such as High-performance computing (HPC) and Grid jointly with data infrastructure. VI-SEEM is a project that aims at creating a unique Virtual Research Environment (VRE) in Southeast Europe and the Eastern Mediterranean (SEEM), in order to facilitate regional interdisciplinary collaboration, with special focus on the scientific communities of Life Sciences, Climatology and Digital Cultural Heritage. In the frame of the VI-SEEM project, the existing e-Infrastructures are being unify into an integrated platform to better utilize synergies, for an improved service provision within a unified Virtual Research Environment to be provided to scientific communities of high impact in the combined South East Europe and Eastern Mediterranean region. Perhaps the largest focus is on regional climate modelling and weather forecasting, where local weather and regional climate phenomena are investigated. This is complemented by global climate modelling where the impact of global phenomena on the regional climate is the focus. These results are crucial to predict extreme weather in the region and understand the future trends of the regional climate. Another strong field of related research is the study of air pollution that includes the influence on the climate and human health. These activities jointly enable the assessment of the impact on regional climate due to climate change. Climate impact studies provide the analysis of the upcoming change on humans, the environment and society that is so crucial for policy makers.

In this paper we will be present the results from two applications – ACIQLife (Atmospheric Composition Impact on Quality of Life and Human Health) and TVRegCM (Tuning and Validation of the RegCM) in the frame of VI-SEEM project, climate section.

The ACIQLife application is focused on development of a methodology and performing reliable, comprehensive and detailed studies of the impact of lower atmosphere parameters and characteristics on the quality of life (QL) and health risks (HR) for the population in our country. The TVRegCM reached to adaptation

*National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography–Bulgarian Academy of Sciences, Acad. G. Bonchev str., bl. 3 1113 Sofia, Bulgaria (gadzhev@geophys.bas.bg),

†National Institute in Meteorology and Hydrology–Bulgarian Academy of Sciences, 66, Tsarigradsko Shose blvd 1784 Sofia, Bulgaria

TABLE 2.1
Computer resource requirements on 16 CPU-s for 1 Day simulation for ACIQLife

	WRF	CMAQ and SMOKE	Total
Time (h)	3	2	5
HDD (GB)	0.5	1	1.5

TABLE 2.2
Computer resource requirements on 16 CPU-s for TVRegCM

	1 Month Simulation	x120 Months	x20 Cases
Time (h)	6	720	14400
HDD (GB)	6	720	14400

and tuning of the RegCM model for the Balkan Peninsula and Bulgaria and thus development of a methodology able to predict possible changes of the regional climate for different global climate change scenarios and their impact on spatial/temporal distribution of precipitation, hence the global water budgets, to changes of the characteristics and spatial/temporal distribution of extreme, unfavorable and catastrophic events (drought, storms, hail, floods, fires, sea waves, soil erosion, etc.). All these changes will have influence on the ecosystems and on practically all sectors of the economy and human activity and consequently on the quality of life.

2. HPC computing.

The model simulations were performed day by day for two periods.

The computer resource requirements for the (WRF) Weather Research and Forecasting Model, (SMOKE) Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modeling System, (CMAQ) The Community Multiscale Air Quality Modeling System and RegCM, simulations are rather big [16] (Tables 2.1 and 2.2) and that is why the numerical experiments were organized in effective High-performance computing (HPC) environment. The simulations were organized in two separate jobs: one job for WRF simulations and one job for SMOKE, CMAQ and post-processing procedures. This makes the jobs run time for 6 days real time fairly reasonable for ACIQLife application and 3 months for TVRegCM application.

The calculations were implemented on the Supercomputer System Avitohol at IICT-BAS (Institute of Information and Communication Technologies–Bulgarian Academy of Sciences). The supercomputer consists of 150 HP Cluster Platform SL250S GEN8 servers, each one equipped with 2 Intel Xeon E5-2650 v2 8C 2600 GHz CPUs and 64GB RAM per server. The storage system is HP MSA 2040 SAN with a total of 96 TB of raw disk storage capacity. All the servers are interconnected with fully non-blocking FDR Infiniband, using a fat-tree topology [1] and [2]. The needed libraries and programs were installed on supercomputer for proper functioning and working of models used in this study. The Avitohol system is a part of the Virtual Research Environment platform (VRE platform) built in the framework of the VI-SEEM project [3]. The both applications - ACIQLife and TVRegCM use not only HPC resources provided by the VRE platform, but they use also other services like VI-SEEM Simple Storage (VSS) and VI-SEEM Archival Service (VAS) to save the obtained data. The training materials about both applications are available in the VI-SEEM Training portal [4] and [5]. According the VI-SEEM accounting system [6], 730 ACIQLife jobs and 810 TVRegCM jobs were run to receive some of the current scientific results. The needed CPU time and storage per job is shown in the Tables 2.1 and 2.2.

The models output from ACIQLife and TVRegCM applications are uploaded on VRE repository website. The results are free and can be used by the scientific communities in the region. The workflows were also created and uploaded for both applications.

The ACIQLife output is a NetCDF file with surface concentrations on an hourly basis of the most important pollutants (which are used for calculation of AQI) and annually/seasonally averaged hourly values of the different AQI value for the selected area.

The TVRegCM output is also NetCDF file, but for each month of the period and consist of daily and hourly averaged values of the meteorological parameters for the area of interest.

3. ACIQLife application.

Some extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Bulgaria and Sofia have been recently performed. Quite extensive data base has been created from the



FIG. 3.1. Model domains - D1 81×81 km (Europe), D2 27×27 km (Balkan Peninsula), D3 9×9 km (Bulgaria), D4 3×3 km (Sofia region) and D5 1×1 km (Sofia city).

simulations which is used for different studies of the atmospheric composition, including the AQ climate.

The atmospheric composition studies were based on extensive computer simulations carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data. All the simulations were based on the United States Environmental Protection Agency (US EPA) Model-3 system, which consists of 3 models: WRF [7] used as meteorological pre-processor; CMAQ [8, 9] and [10] – the Community Multiscale Air Quality System, being the Chemical Transport Model (CTM) and SMOKE [11, 12] – the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System – the emission pre-processor. The simulations were performed for 7 years period (2008 to 2014) with Two-Way Nesting mod on.

The large scale (background) meteorological fields, used by the application were taken from the National Centers for Environmental Prediction (NCEP) Global Analysis Data with 1°×1° resolution. The WRF and CMAQ nesting capabilities were used to downscale the simulations to a 9 km for domain D3 – Bulgaria and to a 1 km horizontal resolution for the innermost domain – Sofia. The simulations were carried out for 5 nested domains Figure 3.1. The used WRF model parametrizations and schemes are as follows: micro physics – WRF single moment 6-class , cumulus physics – Kain-Fritsch, boundary layer scheme – ACM2Pleim, surface physics – Pleim-Xiu Land Surface Model and the model vertical levels are 27.

The Bulgarian emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the high resolution inventory of the the Netherlands Organization for Applied Scientific Research (TNO, see <https://www.tno.nl/en/>) with resolution 20×15 km ($0.25^\circ \times 0.125^\circ$) was exploited. The latest one is produced by proper disaggregation of the European Monitoring and Evaluation Program (EMEP) 50-km data base [13, 14]. In both inventories the emissions are distributed over 10 Selected Nomenclature for Sources of Air Pollution (SNAP) categories [15].

The Air Quality is a key element for the well-being and quality of life of the European citizens and that is why the AQ impact on human health and quality of life is an issue of great social significance. The AQ impact on human health and quality of life is evaluated in the terms of Air Quality Indices (AQI), which give an integrated assessment of the impact of pollutants and directly measuring the effects of AQ on the human health. The evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ for Bulgaria and Sofia city carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data [16, 17, 18]. All the AQI evaluations are on the basis of air pollutant concentrations obtained from the numerical modelling and make it possible to reveal the climate of AQI spatial/temporal distribution and behavior. The AQI is defined as a measure of air pollution and provides an integrated assessment of the impact of the pollutants on human health. The index is defined in several segments, each of which is a linear function of the concentration of each pollutant

TABLE 3.1
Air Pollution Bandings and Index Impact on Human Health

Banding	Value	Health Descriptor
Low	1–3	Effects are unlikely to be noticed even by individuals who know they are sensitive to air pollutants
Moderate	4–6	Mild effects, unlikely to require action, may be noticed among sensitive individuals.
High	7–9	Significant effects may be noticed by sensitive individuals and action to avoid or reduce these effects may be needed. Asthmatics will find that their 'reliever' inhaler is likely to reverse the effects on the lung.
Very High	10	The effects on sensitive individuals described for 'High' levels of pollution may

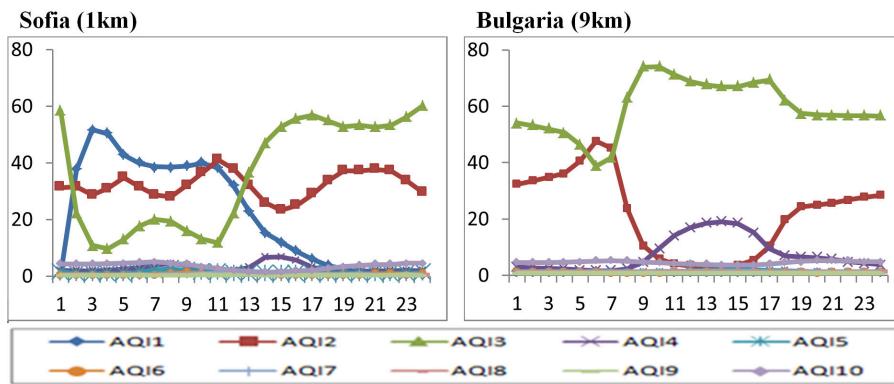


FIG. 3.2. *Annual Diurnal variations [%] of the different AQI (1 to 10) integrated over territory of Bulgaria and Sofia*

considered [19]. The index falls in different ranges of the dimensionless scale. In each range the index values are associated with an intuitive color code ((from green to red), a linguistic description (e.g. from very good to very poor) and a health description. In order to evaluate the air quality situation in Europe, all measurements are transformed into a single relative figure: the Common Air Quality Index (CAQI) which has 5 levels using a scale from 0 (very low) to > 100 (very high). The index is based on 3 pollutants of major concern in Europe: Particulate matter, with diameter <10µm (PM10), Nitrogen Dioxide NO₂, Ozone O₃ and will be able to take into account to 3 additional pollutants Carbon Oxide (CO), Particulate matter with diameter <2.5µm (PM2.5) and Sulphur Dioxide SO₂. In different countries use different AQI on basis of different monitor pollutants.

The index, calculated in Bulgaria in the frame of Bulgarian Chemical Weather Forecast System [20, 21, 22], follows the United Kingdom (UK) Daily Air Quality Index [23]. This index has ten grades, which are further grouped into 4 bands: low, moderate, high and very high and is based on the concentrations of 5 pollutants - NO₂, O₃, SO₂, CO and PM10 (Table 3.1). Different averaging periods are used for different pollutants. The reference levels and Health Descriptor used in the tables are based on health-protection related limit, target or guideline values set by the European regulations, at national or local level or by the World Health Organization [24, 25].

Annually averaged hourly values of the AQI for Sofia and Bulgaria with different horizontal grid resolution are presented in Figure 3.2. The graphs represent the daily percent recurrence of the AQI (1 to 10). This results, allow to follow highest recurrence of the indices during the day (during the seasons), and to analyze the possible reason for high values in the High and Very High bands. The meteorological conditions from one hand and the pollutant emissions from other one could be the cause for different possible AQI statuses. That representation of the index makes it possible to evaluate the atmospheric composition in the context of impacts on human health and quality of life.

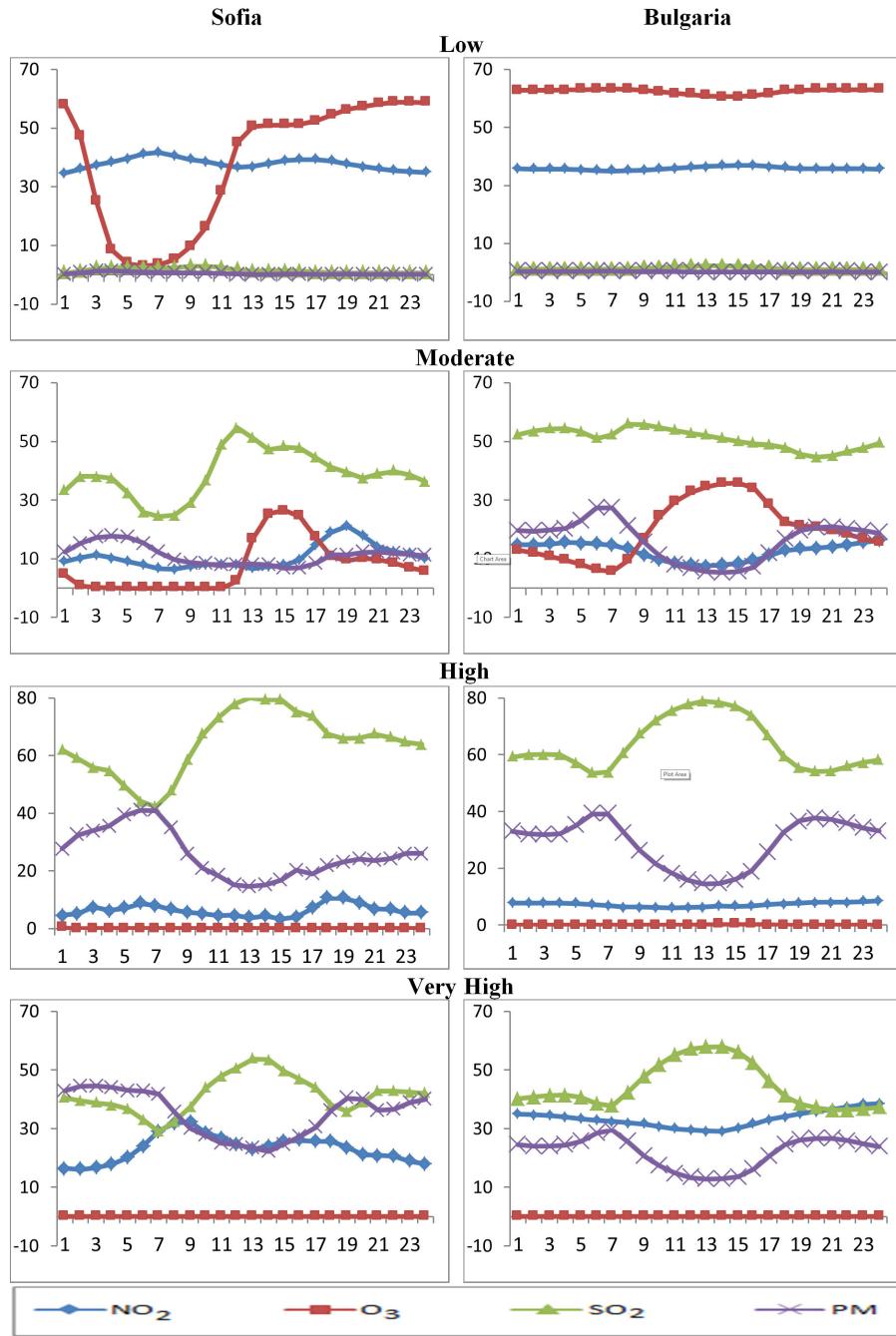


FIG. 3.3. Diurnal variations of the annually averaged recurrence [%] of the dominant pollutant.

The graphics on Figure 3.3 demonstrate the annual recurrence of the pollutant with highest AQI, which determines the overall AQI for the 4 bands (the dominant pollutant). The pollutants involved in the calculation of AQI – NO_2 , O_3 , SO_2 and PM are presented in different colours. The seasonal cases are not present here, but they differ from the annually averaged graphics. The dominant pollutants are different for each band with well displayed diurnal course.

The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribu-

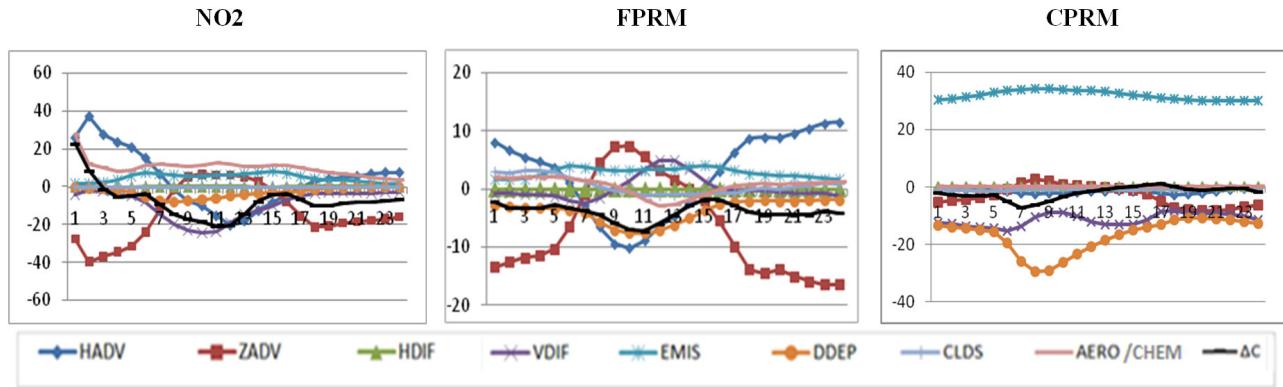


FIG. 3.4. Annually averaged contribution of the different processes to the formation of NO_2 [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] and FPRM, CPRM [$\text{pPM}\text{v}/\text{h}$] for Sofia city.

tion of each one of these processes for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal behavior could be helpful for understanding the atmospheric composition formation and air pollutants behavior. Therefore the CMAQ "Integrated Process Rate Analysis" option was applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation. The procedure allows the concentration change for each compound for an hour ΔC to be presented as a sum of the contribution of the processes, which determine the concentration. The results were averaged over the whole ensemble and so the "typical" seasonal and annual evaluations were obtained.

The diurnal/annual behavior of the processes contribution to the surface concentrations change of pollutant NO_2 , fine- and coarse particulate matter (FPRM and CPRM), averaged for the territory of Sofia, is given in Figure 3.4. The considered processes are advection (horizontal – HADV – and vertical – VADV), diffusion (horizontal – HDIF – and vertical – VDIF), mass adjustment, emissions (EMIS), dry deposition (DDEP), chemistry (CHEM), aerosol processes (AERO) and cloud processes/aqueous chemistry (CLDS) and they are present in different colors.

The total concentration change (ΔC), leading to a change in a concentration is determined mainly by a small number of dominating processes which have large values, and could be with opposite sign and phases. The ΔC is different for each pollutant with well displayed seasonal and diurnal course. The sign of the contributions of some of the processes is obvious, but some of them may have different sign and it depends on the type of emissions, weather conditions and local atmospheric dynamics.

4. Conclusion related to ACIQLife. A very small part of the obtained results is presented in the present paper, just to demonstrate the opportunity HPC platforms give for detailed and extensive study of the atmospheric composition its behavior, origin and health impact. Due to volume limitations the spatial variability of the air pollution characteristics is not demonstrated at all.

The generated ensembles of atmospheric composition characteristics have still to be carefully and extensively treated and analyzed, which will be objective of the future work of the authors.

5. TVRegCM application. The simulations with the RCM RegCM version 4.4 [26] were made for the SE Europe covering ten years period from 01.12.1999 to 30.11.2009 and are driven by the ERA-Interim reanalysis [27], providing the required atmospheric Initial and Boundary Conditions (ICBC) as well as sea surface temperatures. The ERA-Interim boundary conditions can be considered to be of very high quality [27], particularly in the Northern Hemisphere extratropical areas where reanalysis uncertainty is negligible [28]. The simulation domain covers entirely the Balkan Peninsula, a minor part of Italy and a part of Asia Minor Peninsula. The model grid is in Lambert Conformal Conic projection with spatial resolution of 10 km. Hence the previous experiments reveals that time step equal to 25 seconds, and 27 vertical levels are optimal, they are selected for the model integration. The default land surface parameterization method in RegCM4 is the BATS scheme [29]. In the current study, we have used it without the subgridding option. The considered

planetary boundary layer (PBL) schemes are the one proposed by Holstlag [30, 31] and the University of Washington (UW) [32, 33]. One of the most significant novelties in RegCM4.4 is the incorporation of the new cloud microphysics scheme (for brevity: M-scheme), proposed by Nogherotto and Tompkins (NT) [34]. EURO-CORDEX (<http://www.euro-cordex.net/>) is the European branch of the international CORDEX initiative, which is a program sponsored by the World Climate Research Program (WRCP) to organize an internationally coordinated framework to produce improved regional climate change projections for all land regions worldwide. Med-CORDEX (<https://www.medcordex.eu/>) project has been proposed by the Mediterranean climate research community within EURO-CORDEX as a follow-up of previous and existing initiatives. The NT-scheme was released after MedCORDEX experiments started. The cumulus convection (CC) parameterizations include Grell scheme [35] with Arakawa-Schubert (AS) [36] and Fritsch-Chappell (FC) closure assumption [37], Emanuel scheme [38, 39], Tiedtke scheme [40] and Kain-Fritsch scheme [41, 42]. The simulations with Kuo [43] convective parameterization scheme have shown instability and interruptions of the model simulations at some periods, so was not used in the present research.

Thus, the number of the possible combinations, which means RegCM4.4 model set-ups, between 2 PBL schemes, 2 M-schemes and 5 CC ones, is 20 and the performance of all of them have been investigated.

The well-known and freely available for the research community data-base E-OBS version 12.0 of the European Climate Assessment & data-set (ECA&D) project [44] is used as reference in the model validation. E-OBS is based only on observations, covers entire Europe and the surroundings, and the version with $0.25^\circ \times 0.25^\circ$ regular grid spacing is implemented. It is worthy to emphasize that E-OBS is the standard validation data-base for the EURO-CORDEX.

Hence the multi-annual seasonal mean temperature (referred further for brevity only temperature) and the multi-annual seasonal mean precipitation sum (precipitation) are probably the most important quantities from climatological point of view, the validation study thus far is focussed on them. The E-OBS is on daily basis and RegCM is set to produce output on every 6 hours. Thus, the climatological quantities are calculated after every successive model run with the CDO operators [45]. The detailed results from the validation are presented in [46]. Only the most relevant conclusion will be listed briefly here.

According to the simulated temperature behavior, the models can be divided in two groups those with prevailing warm bias and those with prevailing cold bias. Generally, the biases are more remarkable in the summer than in the winter and are in the interval from about -3.5°C to 3.5°C , but over the bigger part of the domain typically from about -2°C to 2°C .

The simulation outcome from all 20 model set-ups produces almost identical picture for the precipitation distribution in winter: The biases are nearly equally distributed and are positive (i.e. the model overestimates the precipitation), with some minor exceptions. The summer biases however, show significant distinction in their distribution and magnitude. They are positive, with some minor exception in Greece. Generally, the precipitation biases however, are very big. Their values vary from below -100% to above 160%.

The main conclusions are, first, that the relative weight of the CC-schemes is the biggest and, second, the simulations with the smallest biases are with Grell one with the both closures. The sensitivity of RegCM4.4 to the PBL- and M-scheme seems is significantly weaker. Thus, there are not clear evidences for clear distinction between the model skill with Holstlag or UW PBL parameterization from one side or for over performance of the NT M-scheme in comparison with the default SUBEX. As overall, 7 from 20 model setups show recognizable better performance. They are listed in Table 5.1.

Main aim of the current, second stage of TVRegCM is to "narrow" the selection, i.e. to perform further examination of these 7 model configurations.

Our previous results [46, 47] indicate that the biases are bigger in summer. Thus, we will use another approach to assess the model performance in that season, called Taylor diagram [48]. The observation data base is E-OBS version 13.1, but the differences with the version 12.0 are insignificant for our purpose. We will consider the temporal and spatial Taylor diagrams of the normalized (in such a way that the observations standard deviation is equal to the model results with respect to the temporal and spatial variability respectively, for the mean summer daily 2m temperature and the mean summer daily rainfall from 2001 to 2008 years. The spatial diagram is constructed from the season average for each location, and the temporal diagram from the spatial average by whole domain on daily basis. The correlation is shown by radial dashed lines, and the

TABLE 5.1

List of the model set-ups with better (in comparison with the others) performance. The original index and notation is preserved from the first stage of TVRegCM experiment

Index	Notation	ICBC	PBL-scheme	M-scheme	CC-scheme
1	r11111	EIN15	Holtslag	SUBEX	Grell/FC
2	r11112	EIN15	Holtslag	SUBEX	Grell/AS
5	r11155	EIN15	Holtslag	SUBEX	Kain-Fritsch
11	r12121	EIN15	UW	SUBEX	Grell/AS
12	r12122	EIN15	UW	SUBEX	Grell/FC
15	r12155	EIN15	UW	SUBEX	Kain-Fritsch
16	r12221	EIN15	UW	Nogherotto/Tompkins	Grell/AS

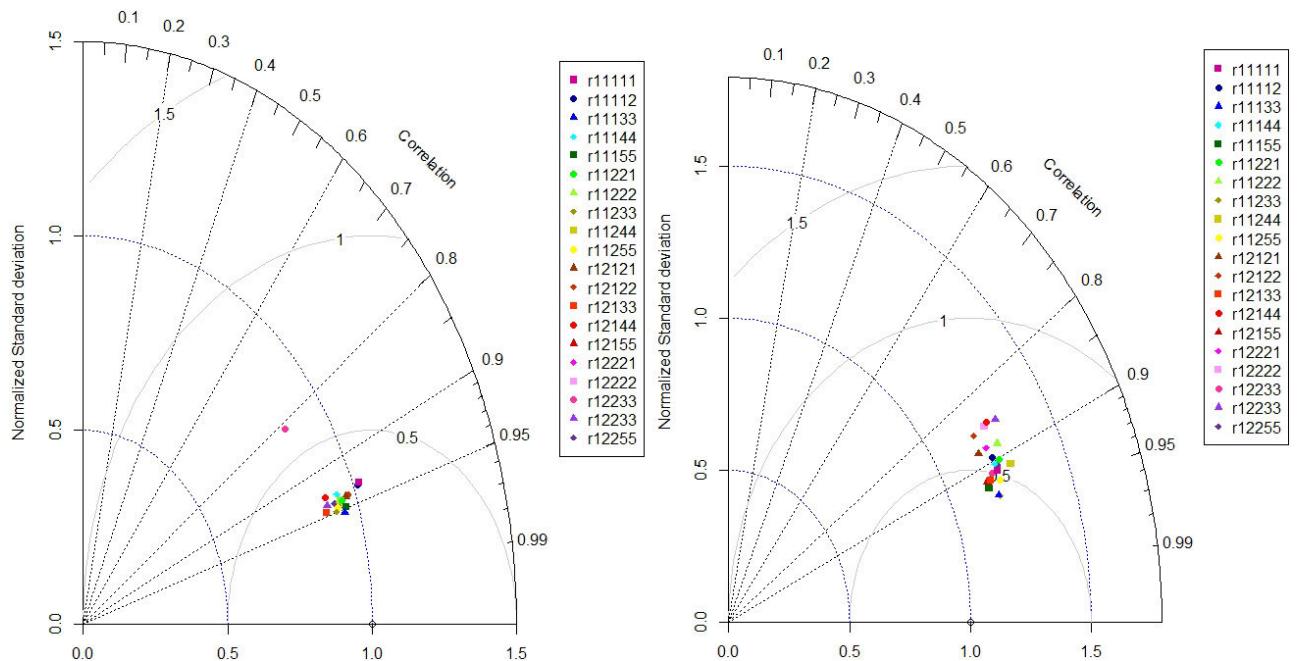


FIG. 5.1. Taylor diagrams for the mean summer daily temperature concerning the temporal (on left) and spatial (on right) variability

normalized standard deviation on the horizontal and vertical axes. The normalization is made in a way that the reference standard deviation is 1. The lines of centered root mean square difference (RMSD) values are also given.

The Taylor diagram of the mean summer daily temperature for temporal variability is given on the left pane of Figure 5.1. The simulations are depicted by solid color points, and the reference E-OBS data by an empty circle. The normalized standard deviations are below 1.0, except for the cases r11111 and r11112. All simulations except r12222 have RMSD below 0.5. Although relatively small differences, the simulation cases with the slightly better than other cases performances are r11133, r11233, r12133. The Taylor diagram of the mean summer daily temperature concerning the spatial variability is shown on the right pane of Figure 5.1. The correlation coefficient is between about 0.85 and 0.95. The normalized standard deviation is between 1.0 and 1.5, and the RMSD in most cases is above 0.5. The simulations with the best performance are r11233, r11133 and r11155.

The Taylor diagram with respect of the temporal variability of the mean summer daily precipitation is shown on the left pane of Figure 5.2. The normalized standard deviations are between 0.75 and 1.5. The RMSD

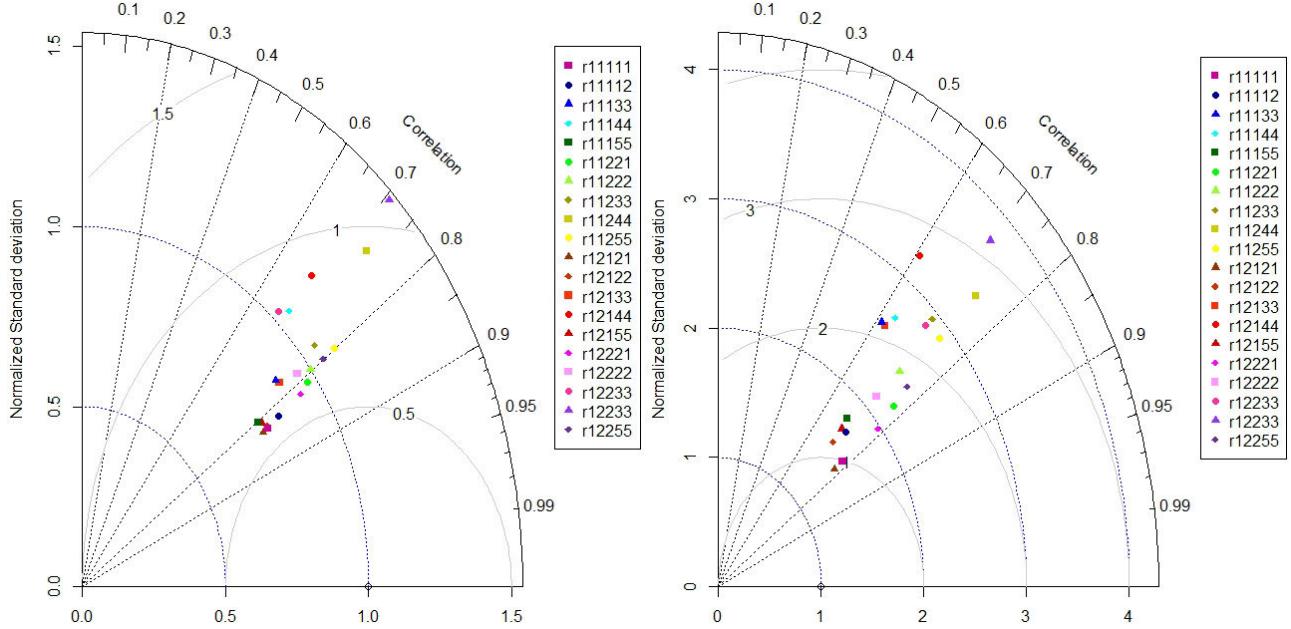


FIG. 5.2. Same as Figure 5.1, but for the precipitation

are between 0.5 and 1.1, and the correlation is between 0.65 and 0.85. The simulations results are much more scattered than the ones for the mean daily temperature. The performance of the cases is more distinguishable, and the best ones are r12121, r12122, r11111, r12155 and r11155.

The Taylor diagram of the the mean summer daily precipitation with respect to the spatial variability is shown on the right pane of Figure 5.2. The scattering of the simulation points are bigger than for the mean daily temperature ones, as in the Taylor diagram with respect to the temporal variability. The correlation coefficient is between 0.6 and 0.8. The normalized standard deviation is from about 1.2 to 4.0, and the RMSD is between 1.5 and 2.5. The cases with the best performance are r12121 and r11111, although r12122, r11112, r12155 and r11155 form a cloud of points with slightly worse performance but with normalized standard deviation below 2.

6. Conclusion related to TVRegCM. The main conclusion of the presented part of the RegCM numerical experiment is that our new test does not reveal single one model set-up that definitely over performs the other considered ones. Nevertheless this exercise was a necessary step forward in the authors' evaluation strategy.

The results of the model temperature field lead us to the following conclusions. The spatial variability is bigger than the temporal one. It is worth to note that the choice of the boundary layer scheme also has some meaning in a spatial variation meaning. The cases with Holstag boundary layer scheme show more resemblance with the observations, than the simulations with UW boundary layer scheme. We can note that the best convective scheme concerning the temperature field is of the Tiedtke.

The spatial variability of the precipitation field is bigger than the temporal one, and from the spatial one for the temperature. The results for the model mean daily precipitation variability on the other hand is as much as about 2 times the reference one and the correlation is weaker than the one for the temperature. Therefore, the model performance is worse for the precipitation than for the temperature. The results suggest that the Grell scheme with FC or AS closures is the best scheme for the precipitation simulation. Although, the Kain-Fritsch cumulus convective scheme with SUBEX moisture scheme and Holstag boundary layer parameterization scheme is also a good case. These results confirm our previous ones [46, 47] that the results for temperature are more spatially homogeneous and the correlation for the temperature field is higher than the one for precipitation. The bigger, in comparison with the temperature, spread of the results on the Taylor diagram for the precipitation demonstrates the bigger sensitivity of this output variable from the parameterization selection and combination

from different schemes. The results, together with these from the previous stage, are in general agreement with the outcomes in [49] and [50]. In particular, we confirm the outlined in [50] primary importance of the convection scheme. Obviously, many other factors have to be investigated, including:

- It is relevant to investigate the model option to switch the CC-scheme by transition from land to sea and vice versa. It is worth to emphasize that the default setting (and it is explicitly recommended from the RegCM authors'), which is confirmed in [50], is Grell over land and Emanuel over sea.
- It is necessary to perform sensitivity tests over shorter periods, including case studies for warm/cold/wet/dry years.
- Other output quantities, which are more or less also relevant for many practical applications, such as cloud cover, soil moisture, radiation fluxes, etc should be also considered. Although the availability of independent data-sets, which can be used as reference, seems limited, this further step seems is reasonable.
- The computational efficiency of the selected model set-ups should be estimated.

7. Conclusion. The virtual research environment platform allows to different scientific communities to make research which require big computational and storage resources. A small part of the obtained results from both applications are presented in the present paper, just to demonstrate the opportunity of HPC platforms.

Acknowledgments. Deep gratitude to the organizations and institutes (ICTP, ECMWF, NCEP-NCAR, ECA&D, Unidata, MPI-M, EMEP, TNO, and all others), which provides free of charge software and data. Without their innovative data services and tools this study would not be possible.

Special thanks to:

- VRE for regional Interdisciplinary communities in Southeast Europe and the Eastern Mediterranean (VI-SEEM), Horizon 2020 project 675121
- The EC-FP7 grant PIRSES-GA-2013-612671 (project REQUA)
- Bulgarian National Science Fund (grant DN-04/2/13.12.2016)
- Program for career development of young scientists, BAS.

REFERENCES

- [1] E. ATANASSOV, T. GUROV, A. KARAIANOVA, S. IVANOVSKA, M. DURCHOVA AND D. DIMITROV *On the Parallelization Approaches for Intel MIC Architecture*, AIP Conf. Proc. 1773, 070001 2016 <http://dx.doi.org/10.1063/1.4964983>.
- [2] A. RADENSKI, T. GUROV, ET AL *Big Data Techniques, Systems, Applications, and Platforms: Case Studies from Academia*, in Annals of Computer Science and Information Systems, Volume 8, Proceedings of the 2016 Federated Conference on Computer Science and Information Systems" FedCSIS'16, 2016, pp. 883–888 DOI:<http://dx.doi.org/10.15439/978-83-60810-90-3>.
- [3] <https://vi-seem.eu/>
- [4] <https://training.vi-seem.eu/index.php/domain-specific-software-and-tools/climate-software-and-tools#tuning-and-validation-of-the-regcm-tvregcm>
- [5] <https://training.vi-seem.eu/index.php/domain-specific-software-and-tools/climate-software-and-tools#atmospheric-composition-impact-on-quality-of-life-and-human-health-wrf-cmaq-aciqlife>
- [6] <https://accounting.vi-seem.eu>
- [7] W. SHAMAROCK, J. KLEMP, J. DUDHIA, D. GILL, D. BARKER, W. WANG, J. POWERS *A description of the Advanced Research WRF Version 2* 2007 http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
- [8] D. BYUN, J. YOUNG, G. GIPSON, J. GODOWITCH, F.S. BINKOWSKI, S. ROSELLE, B. BENJAY, J. PLEIM, J. CHING, J. NOVAK, C. COATS, T. ODMAN, A. HANNA, K. ALAPATY, R. MATHUR, J. MCHENRY, U. SHANKAR, S. FINE, A. XIU, AND C. JANG *Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System*, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11–16 January 1998, Phoenix, Arizona, 264–268.
- [9] D. BYUN AND J. CHING *Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System*. EPA Report 600/R-99/030, Washington DC, 1999 <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>
- [10] *CMAQ user guide* 2006. [Online] Available from: <https://www.cmascenter.org/help/documentation.cfm?model=cmaq&version=4.6>
- [11] CEP *Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System*, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina, 2003.
- [12] D. SCHWEDE, G. POULIOT, AND T. PIERCE *Changes to the Biogenic Emissions Inventory System Version 3 (BEIS3)*, Proc. of 4th Annual CMAS Models-3 Users's Conference, September 26–28, 2005, Chapel Hill, NC.

- [13] V. VESTRENG *Emission data reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the spatial distribution of emissions* Meteorological Synthesizing Centre – West, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway, Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1/2001, 2001.
- [14] V. VESTRENG, K. BREIVIK, M. ADAMS, A. WAGNER, J. GOODWIN, O. ROZOVSKAYA, J.M. PACYNA *Inventory Review 2005 (Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive)*, Technical Report MSC-W 1/2005, EMEP, 2005
- [15] A. VISSCHEDIJK, P. ZANDVELD, H. VAN DER GON *A high resolution gridded European emission database for the EU integrated project GEMS* TNO report 2007-A-R0233/B, The Netherlands Brunekreef B, Holgate S: Air pollution and health., Lancet 2002, 2007, 360: 1233–1242
- [16] GADZHEV, G., GANEV, K., PRODANOVA, M., SYRAKOV, D., ATANASOV, E., MILOSHEV, N *Multi-scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria* NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security, 137, 2013, 381–385.
- [17] GADZHEV G., K. GANEV, N. MILOSHEV, D. SYRAKOV, AND M. PRODANOVA *Analysis of the Processes Which Form the Air Pollution Pattern over Bulgaria* in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014, 390–396.
- [18] GADZHEV G., K. GANEV, N. MILOSHEV, D. SYRAKOV, AND M. PRODANOVA *Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria – Grid Computing Simulations* in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014, 484–490.
- [19] EPA *Technical assistance document for the reporting of daily air quality—the Air Quality Index (AQI)* EPA- 454/B-09-001, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina 27711, 2009.
- [20] SYRAKOV, D., ETROPOLSKA, I., PRODANOVA, M., GANEV, K., MILOSHEV, N., SLAVOV, K. *Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria*, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1487, 2012, 88–94;
- [21] SYRAKOV, D., ETROPOLSKA, I., PRODANOVA, M., SLAVOV, K., GANEV, K., MILOSHEV, N., LJUBENOV T. *Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to Sofia city*, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1561, 2013, 120–132.
- [22] SYRAKOV D., M. PRODANOVA, I. ETROPOLSKA, K. SLAVOV, K. GANEV, N. MILOSHEV, AND T. LJUBENOV *A Multy-Domain Operational Chemical Weather Forecast System* in I. Lirkov et al. (Eds.): LSSC 2013, LNCS 8353, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014, 413–420,
- [23] LEEUW, F. DE, MOL, W. *Air Quality and Air Quality Indices: a world apart* ETC/ACC Technical Paper 2005/5, 2005, http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACCTechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf
- [24] WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO) *Fact Sheet Number 187*, 2000
- [25] WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO) *Health Aspects of Air Pollution. Results from the WHO Project Systematic Review of Health Aspects of Air Pollution in Europe*, 2004.
- [26] F. GIORGI AND 20 OTHERS *RegCM: model description and preliminary tests over multiple CORDEX domains*, Clim. Res., 52, 2012, 7–29
- [27] D. P. DEE, S. M. UPPALA, A. J. SIMMONS, P. BERRISFORD, P. POLI, S. KOBAYASHI, U. ANDRAE, M. A. BALMASEDA, G. BALSAMO, P. BAUER, P. BECHTOLD, A. C. M. BELJAARS, L. VAN DE BERG, J. BIDLOT, N. BORMANN, C. DELSOL, R. DRAGANI, M. FUENTES, A. J. GEER, L. HAIMBERGER, S. B. HEALY, H. HERSBACH, H., E. V. HÈLM, L. ISAKSEN, P. KÅLLBERG, M. KÖHLER, M. MATRICARDI, A. P. McNALLY, B. M. MONGE-SANZ, J. J. MORCRETTE, B. K. PARK, C. PEUBEY, P. DE ROSNAY, C. TAVOLATO, J. N. THÈPAUT AND F. VITART *The ERA-Interim reanalysis: configuration and performance of the data assimilation system*. Q.J.R. Meteorol. Soc., 2011, 137: 553–597. doi:10.1002/qj.828
- [28] S. BRANDS, J. M. GUTIÉRREZ, S. HERRERA AND A. S. COFIÑO *On the Use of Reanalysis Data for Downscaling*, J. Climate, 25, 2012, 2517–2526.
- [29] R. E. DICKINSON, A. HENDERSON-SELLERS, AND P. J. KENNEDY *Biosphere-atmosphere transfer scheme (BATS) version 1e as coupled to the NCAR community climate model*, Tech. rep., National Center for Atmospheric Research, 1993
- [30] A. A. M. HOLTSLAG, E. I. F. DE BRUIJN AND H.-L. PAN *A high resolution air mass transformation model for shorstrange weather forecasting*, Mon. Wea. Rev., 118, 1990, 1561–1575.
- [31] A. A. M HOLTSLAG AND B. A. BOVILLE *Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model*, J. Climate, 6, 1993, 1825–1842
- [32] C. S. BRETHERTON, J. MCCAA, AND H. GRENIER *A new parameterization for shallow cumulus convection and its application to marine subtropical cloud-topped boundary layers. part I: Description and 1D results*, Monthly Weather Review, 132, 2004, 864–882
- [33] H. GRENIER AND C. S. BRETHERTON *A moist PBL parameterization for large-scale models and its application to subtropical cloud-topped marine boundary layers*, Monthly Weather Review, 129, 2001, 357–377
- [34] N. ELGUINDI, X. BI, F. GIORGI, B. NAGARAJAN, J. PAL, F. SOLMON, S. RAUSCHER, A. ZAKEY, T. O'BRIEN, R. NOGHEROTTO AND G. GIULIANI *Regional Climate Model RegCM User Manual Version 4.4.*, 2014, p.34, ICTP, Trieste
- [35] G. GRELL *Prognostic evaluation of assumptions used by cumulus parameterizations*, Mon. Wea. Rev., 121, 1993, 764–787
- [36] A. ARAKAWA, W. H. SCHUBERT *Interaction of a cumulus cloud ensemble with the large scale environment. Part I*. J. Atmos. Sci., 31, 1974, 674–701.
- [37] J. M. FRITSCH AND C. F. CHAPPEL *Numerical prediction of convectively driven mesoscale pressure systems. Part I: Convective parameterization*. J. Atmos. Sci., 37, 1980, 1722–1733
- [38] K. A. EMANUEL *A scheme for representing cumulus convection in large-scale models*, J. Atmos. Sci., 48(21), 1991 ,2313–2335
- [39] K. A. EMANUEL AND M. ZIVKOVIC-ROTHMAN. *Development and evaluation of a convection scheme for use in climate models*, J. Atmos. Sci., 56, 1999, 1766–1782
- [40] M. TIEDTKE *A Comprehensive Mass Flux Scheme for Cumulus Parameterization in large-scale models*. Bulletin of the American Meteorological Society, 117, 1989, 1779–1800

- [41] J. S. KAIN *The Kain-Fritsch convective parameterization: an update*. J Appl Meteorol 43, 2004, 170–180
- [42] J.S. KAIN AND J. M. FRITSCH *A one-dimensional entraining/detraining plume model and its application in convective parameterization*. J Atmos Sci 47, 1990 , 2784–2802
- [43] R. A. ANTHES *A cumulus parameterization scheme utilizing a one-dimensional cloud model*, Mon. Wea. Rev., 105, 1977, 270–286
- [44] M. R. HAYLOCK, N. HOFSTRA, A. M. G. KLEIN TANK, E. J. KLOK, P.D. JONES, M. NEW. *A European daily high-resolution gridded dataset of surface temperature and precipitation*. J. Geophys. Res (Atmospheres), 2008, p. 113.
- [45] CDO 2015: CLIMATE DATA OPERATORS. Available at: <http://www.mpimet.mpg.de/cdo>
- [46] GADZEV G., IVANOV, V., GANEV K., CHERVENKOV H. *TVRegCM Numerical Simulations – Preliminary Results*, In: Lirkov I., Margenov S. (eds) Large-Scale Scientific Computing. LSSC 2017. Lecture Notes in Computer Science, 2018 vol 10665, 266–274, Springer, Cham
- [47] CHERVENKOV H. IVANOV, V., GADZEV G., GANEV K. *Sensitivity Study of Different RegCM4.4 Model Set-Ups–Recent Results from the TVRegCM Experiment* Cybernetics and Information Technologies Vol. 17, No. 5 17–26
- [48] TAYLOR K. E. *Summarizing multiple aspects of model performance in a single diagram* Journal of Geophysical Research, 106, 2001, 7183–7192
- [49] S. KOTLARSKI, K. KEULER, O. B. CHRISTENSEN, A. COLETTE, M. DÉQUÉ, A. GOBIET, K. GOERGEN, D. JACOB, D. LÜTHI, E. VAN MELIGAARD, G. NIKULIN, C. SCHÄR, C. TEICHMANN, R. VAUTARD, K. WARRACH-SAGI, AND WULFMAYER, V. *Regional climate modeling on European scales: a joint standard evaluation of the EURO-CORDEX RCM ensemble*. Geosci. Model Dev., 7, 2014, 1297–133
- [50] I. PIECZKA, R. PONGRCZ, K. S. ANDRÈ, F. D. KELEMEN, J. BARTHOLY *Sensitivity analysis of different parameterization schemes using RegCM4.3 for the Carpathian region*, Theor Appl Climatol, 130, 2017, 1175–1188

Edited by: Aneta Karaivanova

Received: Dec 21, 2017

Accepted: Mar 30, 2018

ANALYSIS OF DYNAMICAL AND CHEMICAL PROCESSES WHICH FORM ATMOSPHERIC COMPOSITION OVER BULGARIA

Assist. Prof. Dr. Ivelina Georgieva¹

Assoc. Prof. Dr. Georgi Gadzhev¹

Prof. DSc. Kostadin Ganev¹

Prof. DSc. Nikolay Miloshev¹

¹ National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences, **Sofia, Bulgaria**

ABSTRACT

The atmospheric composition research was based on extensive computer simulations carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data. Extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Bulgaria have been performed using the US EPA Model-3 system used as a modelling tool for 3D simulations. The extensive data base that was created from the simulations was used for different studies of the atmospheric composition. The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each one of these processes for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal profiles could be helpful for understanding the atmospheric composition and air pollutants behaviour. Analysis of the contribution of these different processes (chemical and dynamical) which form the atmospheric composition in chosen region will be demonstrated in the present paper.

Keywords: air pollution modelling, dynamical and chemical processes, ensemble of numerical simulation, atmospheric composition

INTRODUCTION

A statistically robust ensemble of the atmospheric composition over Bulgaria, taking to account the two-way interactions of different processes and track the main pathways and processes, which lead to different scale atmospheric composition formation should be constructed in order to understand the atmospheric composition climate and air pollutants behaviour. The atmospheric composition climate modelling over the Balkan region and particular over Bulgaria results are published in a number of papers [1], [2], [3], [4], [5], [6], [7], [8], [9], [10], but a detailed examination of the processes determining the atmospheric composition have not yet been made and will be presented in the current paper.

On the basis of 3D modelling tools the extensive data base was created and this data was used for different studies of the atmospheric composition, carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data. All the simulations were based on the US EPA (Environmental Protection Agency) Model-3 system for the period of 7 years period (2008 to 2014) The modelling system consists of

Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications

(NMSCAA'18)

In cooperation with
SIAM
and technically co-
sponsored by IEEE PS
Computer Society
Chapter (IEEE)

Editor
**Krassimir
Georgiev**

May 28 – May 31,
2018,
Hissar,
Bulgaria

**Sofia
2018**



Institute of Information and Communication Technologies
Bulgarian Academy of Sciences

Proceedings of the International Conference

**Numerical Methods for Scientific
Computations and Advanced Applications
(NMSCAA'18)**

May 28 – May 31, 2018, Hissarya, Bulgaria

Krassimir Georgiev (Editor)



Institute of Information and Communication Technologies
Bulgarian Academy of Sciences

In cooperation with



Technically co-sponsored by IEEE PS Computer Society Chapter

Sofia, 2018

Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications
(NMSCAA'18)

Proceedings of the International Conference

©2018 by Fastumprint

ISBN: 978-954-91700-7-8

Printed in Sofia, Bulgaria

PREFACE

This book contains papers presented during the International Conference on “Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications” (NMSCAA’18), May 28–May 31, 2018, Hissar, Bulgaria. The conference is organized by the Institute of Information and Communication Technologies, Bulgarian Academy of Sciences in cooperation with Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) and technically co-sponsored by IEEE PS Computer Society Chapter (IEEE) .

The Conference Specific topics of interest are as follows: (a) Multiscale and multi-physics problems; (b) Robust preconditioning; (c) Monte Carlo methods; (d) Optimization and control systems; (e) Scalable parallel algorithms; (f) Advanced computing for innovations; (g) In silico investigations of biological molecules and complexes. The list of the plenary invited speakers includes:

- Owe Axelsson (Institute of Geonics, CAS, Ostrava, Czech Republic);
- Raytcho Lazarov (TA&MU, College Station, Texas, USA);
- Zahari Zlatev (Aarhus University, Roskilde, Denmark);
- Istvan Farago (Eotvos Lorand University, Budapest, Hungary);
- Radim Blaheta (Institute of Geonics, CAS, Ostrava, Czech Republic);
- Svetozar Margenov (IICT-BAS, Sofia, Bulgaria); and
- Ivan Dimov (IICT-BAS, Sofia, Bulgaria).

The Scientific Computing is one of the most prominent examples of a interdisciplinary area involving mathematics, computer science, engineering, physics, chemistry, medicine etc. The tools of Scientific Computing are usually based on mathematical models and corresponding computer codes that are used to perform virtual experiments to obtain new data or to better understand existing experimental results. Numerical Analysis is one of the crucial elements of Scientific Computing. It develops and analyzes numerical methods for discretization of continuous models and their subsequent solution, as well as for approximation of discrete data, such as: data interpolation and extrapolation, methods for solving linear and non-linear systems of algebraic equations (direct and iterative solution methods, preconditioning, multilevel and multigrid methods, etc.), methods for solving systems of ordinary and partial differential equations, methods for solving integral equations, and optimization problems.

Next to Numerical methods and the scientific computations are the Advanced Applications – the implementation of the developed numerical methods into computer codes and their customization for the numerous computing systems and for solving a number of real life problems.

Krassimir Georgiev
May 2018

Table of Contents

Part A: Short Communications/Extended abstracts	1
<i>G. Accaputo, P. Arbenz, P. Derlet</i>	
Solving Large-Scale Eigenvalue Problems in Amorphous Materials	3
<i>E. Atanassov, T. Gurov, M. Durdova, S. Ivanovska, A. Karaivanova</i>	
Study of Scalability and Energy Efficiency of QMC Algorithms on Hybrid HPC Systems	6
<i>O. Axelsson</i>	
Optimality Properties of a Square Block Matrix Preconditioner with Applications	10
<i>M. Beceanu, M. Lachaab</i>	
Fast Computation of Exact Solutions to the Heat and Stokes' Equations on the Half-Line Obtained by Fokas' Transform	14
<i>I. Blagoev, J. Seanova, K. Kolev</i>	
Artificial Neural Network Activation Function Optimization with Genetic Algorithms	16
<i>R. Blaheta, O. Axelsson, T. Luber, J. Krizik, J. Stary</i>	
Preconditioners for Simulation of Flow in Rigid and Deformable Porous Media	20
<i>A. Cesmelioglu</i>	
A Monolithic Scheme for a Fluid-Poroelastic Structure Interaction Problem	24
<i>I. Dimov</i>	
Computational Nano-physics – Monte Carlo Approach	27
<i>B. Duan, R.D. Lazarov, J.H. Pasciak</i>	
Numerical Approximation of Fractional Spectral Elliptic Operators	28
<i>S.-E. Ekström, M. Neytcheva</i>	
Deflation Methods Made Possible	29
<i>I. Faragó, R. Horváth, M. Mincsovics, R. Mosleh, F. Dorner</i>	
Reliable Numerical Models and Their Applications	32
<i>G. Gadzhev, K. Ganev</i>	
Vertical Structure of Atmospheric Composition Fields over Bulgaria	38
<i>I. Georgiev, I. Georgiev</i>	
Performance Analysis of Real-time Applications for Debugging Parameterization	42

<i>I. Georgieva, N. Miloshev</i>	
Computer Simulations of PM Concentrations Climate for Bulgaria	46
<i>S. Harizanov, N. Kosturski, R. Lazarov, S. Margenov, P. Marinov, Y. Vutov</i>	
Numerical Methods for Fractional-in-Space Diffusion Problems	50
<i>S. Harizanov, I. Lirkov, I. Georgiev, J. Stary, S. Zolotarev</i>	
Edge Detection of Radiographic Images through Phantom Blur Denoising	54
<i>Y. Hou, J. Dai, A. J. Niemi, X. Peng, J. He, N. Ilieva</i>	
Study of Non-Proline <i>cis</i> Peptide Planes in Different Protein Framings	56
<i>E. Lilkova, N. Ilieva, P. Petkov, L. Litov</i>	
Study of Human Interferon-Gamma Glycosylation by Molecular Dynamics Simulations	60
<i>K. Liolios, T. Makarios, A. Liolios, K. Georgiev, I. Georgiev</i>	
Monte Carlo Simulation for Seismic Analysis of Egnatia Highway Bridges in Northern Greece	64
<i>D. Slavchev, S. Margenov</i>	
Scalability Analysis of Solvers based on Hierarchical Compression of Dense Matrices and Gaussian Elimination	68
<i>B. Takács, R. Horváth, I. Faragó</i>	
A Non-Symmetric Model of Disease Propagation	72
<i>P. Tomov, I. Zankinski, M. Barova</i>	
Artificial Neural Networks Time Series Forecasting with Android Live Wallpaper Technology	76
<i>F. E. Uilhoorn</i>	
Pareto Optimal Solutions of Noise Statistics for Kalman Filtering Applied to State Estimation of Gas Dynamics	80
<i>Z. Zlatev, I. Dimov, I. Farago, K. Georgiev, A. Havasi</i>	
Implementation of the Three-times Repeated Richardson Extrapolation together with Explicit Runge-Kutta Methods	84
<i>O. Axelsson, S. Sysala</i>	
An adaptive Newton method for solving nonlinear partial differential equations	89
Part B: List of participants	93

Computer Simulations of PM Concentrations Climate for Bulgaria

I. Georgieva, N. Miloshev

Abstract

The numerical simulations of the Particulate matters (PM) fields in Bulgaria have been performed using the US EPA Model-3 system as a modelling tool for 3D simulations and the system nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 9 km resolution over Bulgaria. The national emission inventory was used as an emission input for Bulgaria, while outside the country the emissions are from the TNO high resolution inventory. The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so if know the contribution of each, for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal behavior is very helpful for understanding the atmospheric composition and pollutants behavior. The “Integrated Process Rate Analysis” model option was applied to discriminate the role of different dynamic/chemical processes for the air pollution formation. Numerically obtained PM concentration fields of as well as of determining the contribution of different processes to the formation of surface PM concentrations will be demonstrated in the paper.

Introduction

The air is the living environment of human beings and atmospheric parameters have a great importance for the quality of life. According to the World Health Organization (WHO), between 2.5 and 11% of the total number of annual deaths are due to air pollution [10, 11]). Special attention is paid to primary emitted or secondary formed Particulate Matter (PM), which size varies from $0.01\mu\text{m}$ to $50\mu\text{m}$. The particulates are separate in several fractions: PM10 (diameter $<10\mu\text{m}$), PM2.5 (diameter $<2.5\mu\text{m}$) and ultra-fine PM with diameter $<0.1\mu\text{m}$ (PM01). The topic is especially relevant for Bulgaria, where the situation is especially severe regarding of PM concentrations, and several times exceeded the limit values. The objective of the work is to demonstrate the numerically obtained PM concentration fields of as well as of determining the contribution of different processes to the formation of surface PM concentrations using modeling tools.

1 Methodology

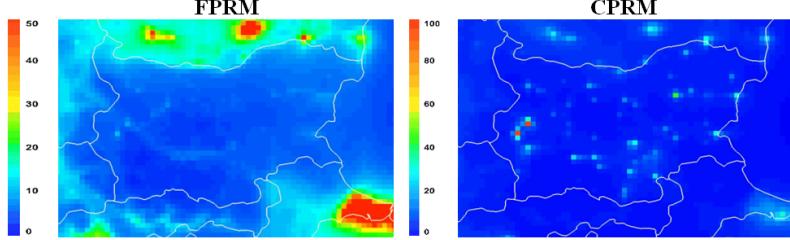
Extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Bulgaria have been performed using up to date modelling tools and detailed and reliable input data [3, 4, 5]. An ensemble, comprehensive enough as to provide statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate, has been constructed. The

used modeling tools is US EPA (Environmental Protection Agency) Model-3 system consists of: Meteorological model WRF (Weather Research and Forecasting)[7], Atmosphere Composition Model CMAQ (Community Multiscale Air Quality)[1] and Emission model SMOKE[2](Sparse Matrix Operator Kernel Emissions). The simulations were performed day by day for 7 years (2008—2014). The NCEP Global Analysis Data meteorological background with $1^{\circ} \times 1^{\circ}$ resolution was used. The models nesting capabilities were applied to downscale the simulations to 9 km for Bulgaria. The TNO high resolution inventory [9] was exploited, and National emission inventory as input for Bulgaria. By averaging the surface concentrations over the whole simulated fields of ensemble were obtained the mean annual and seasonal surface concentrations and used as “typical” daily concentration patterns. In this work the PM are separated in 2 fractions: Fine PM (FPRM) with diameter $< 2.5\mu\text{m}$ and Coarse PM (CPRM) with diameter from $2.5\mu\text{m}$ to $10\mu\text{m}$. The Integrated Process Rate Analysis option was applied to evaluate the concentration change (ΔC) for each compound for an hour, so is presented as a sum of the contribution of the processes. The processes are advection (horizontal HADV and vertical VADV), diffusion (horizontal HDIF and vertical VDIF), emissions (EMIS), dry deposition (DDEP), chemistry (CHEM), aerosol processes (AERO) and cloud processes/aqueous chemistry (CLDS). The models computer resource requirements are rather big [8] and the numerical experiments were organized in effective HPC environment. The calculations were implemented on the Supercomputer System Avitohol at Institute of Information and Communication Technologies Bulgarian Academy of Sciences.

2 Results

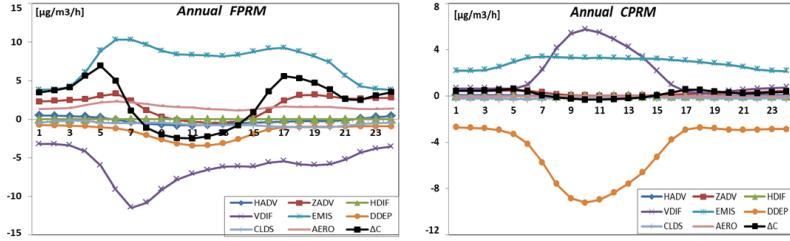
The PM climate and behavior over Bulgaria is evaluated by averaging the surface concentrations over the whole ensemble and the mean annual and seasonal surface concentrations were obtained. Due to volume limits here are present only the annually average surface concentrations for both fractions FPRM and CPRM. According to current Regulation [6] the defined limit values for PM concentrations are: FPRM – $40\mu\text{g}/\text{m}^3$ 24 hour average and $20\mu\text{g}/\text{m}^3$ annual average; CPRM – $50\mu\text{g}/\text{m}^3$ 24 hour average and $40\mu\text{g}/\text{m}^3$ annual average. The results show that there is exceedance the limit values for both PM fractions. For CPRM plots the exceedance is several times mostly at biggest cities in the country Figure 1. The outputs from the Integrated Process Rate Analysis were averaged over the 7 year ensemble and so the “typical” seasonal and annual evaluations were obtained. An example of the diurnal annual behavior of the contribution of different processes to the surface concentration of FPRM and CPRM, averaged for Bulgaria, is given in Figure 2. The processes that were considered are HADV and VADV, HDIF and VDIF, EMIS, DDEP, AERO and CLDS. The graphics show dominant contributions with their sign and phases of each process that leading to concentration change. For the FPRM can be seen that the leading processes are EMIS with positive contribution and VDIF with negative contribution. The EMIS is dominant process for CPRM too, but VDIF has highest positive contribution, and also can be see that DDEP has maximal negative contribution.

Figure 1: Annual surface concentrations for FPRM and CPRM [$\mu\text{g}/\text{m}^3$], averaged for the territory of Bulgaria at 07:00 GMT.



The ΔC has different sign during the day and depending on weather conditions and topography.

Figure 2: Annually averaged contribution of the different processes to the formation of FPRM and CPRM [$\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$] for Bulgaria.



3 Conclusion

Due to volume limitations the spatial and seasonal variability of the PM characteristics is not demonstrated at all, only the annual. The numerically obtained PM concentration fields show the several times exceeded the limit values for concentrations mainly at biggest city in the country. For the whole domain, the ΔC , leading to a change in a concentration is determined by a small number of dominating processes with big values, and the sign and phases of these processes could be opposite. The contributions sign of some processes is obvious, but for some the sign may be changing and can be different, depending on weather conditions, topography and etc.

Acknowledgment

The present work is supported by: the Bulgarian National Science Fund (grant DCVP-04/2/13.12.2016), EU -H2020 project 675121(project VI-SEEM), Program for career development of young scientists, BAS. Deep gratitude to US EPA and US NCEP, EMEP and TNO for providing free-of-charge data and software.

References

- [1] CMAQ user guide, (2006). [Online] Available from: <https://www.cmascenter.org/help/documentation.cfm?model=cmaq&version=4.6>
- [2] CEP (2003) Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Research Triangle Park, North Carolina.
- [3] Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Atanasov, E., Miloshev, N. (2013) Multi-scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria. NATO Science for Peace and Security Series C: Envir. Security, 137, pp. 381-385.
- [4] Gadzhev G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, and M. Prodanova (2014): Analysis of the Processes Which Form the Air Pollution Pattern over Bulgaria, LNCS 8353, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014, pp. 390–396
- [5] Gadzhev G., K. Ganev, N. Miloshev, D. Syrakov, and M. Prodanova (2014): Some Basic Facts About the Atmospheric Composition in Bulgaria — Grid Computing Simulations, LNCS 8353, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2014, pp. 484–490.
- [6] Regulation No. 9 (State Gazette No. 46/1999, amended and supplemented, SG No. 86/2005) <http://eea.government.bg/en/output/daily/pollutants/pm.html>
- [7] Shamarock W., Klemp J., Dudhia J., Gill D., Barker D., Wang W., Powers J., (2007) A description of the Advanced Research WRF Version 2, http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
- [8] Todorova, A., Syrakov, D., Gadzhev, G., Georgiev, G., Ganev, K.G., Prodanova, M., Miloshev, N., Spiridonov, V., Bogatchev, A., Slavov, K. (2010) Grid computing for atmospheric composition studies in Bulgaria. Earth Sc. Inf., 3 (4), 259-282
- [9] Visschedijk, A., Zandveld P., van der Gon, H. (2007) A high resolution gridded European emission database for the EU integrated project GEMS, TNO report 2007-A-R0233/B, The Netherlands Brunekreef B, Holgate S: Air pollution and health., Lancet 2002, 360:1233-1242.
- [10] World Health Organization (WHO), 2000, Fact Sheet Number 187
- [11] World Health Organization (WHO), 2004, Health Aspects of Air Pollution. Results from the WHO Project Systematic Review of Health Aspects of Air Pollution in Europe.



HARMO19

**19th International Conference on
Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
3-6 June 2019, Bruges, Belgium**

ANALYSIS OF THE CONTRIBUTION OF DIFFERENT PROCESSES (CHEMICAL AND DYNAMICAL) WHICH FORM THE ATMOSPHERIC COMPOSITION IN SOFIA

Ivelina Georgieva¹, Georgi Gadzhev¹, Kostadin Ganev¹, Nikolay Miloshev¹

¹ National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography – Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria

Abstract: The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each one of the processes for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal profiles could be helpful for understanding the atmospheric composition and air pollutants behaviour. Analysis of the contribution of these different processes (chemical and dynamical) which form the atmospheric composition in chosen region will be demonstrated in the present paper. To analyse the contribution of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation over Sofia the CMAQ “Integrated Process Rate Analysis” option was applied. The procedure allows the concentration change for each compound to be presented as a sum of the contribution of each one of the processes, which determine the air pollution concentration. A statistically robust ensemble of the atmospheric composition over Sofia, taking into account the two-way interactions of local to urban scale and tracking the main pathways and processes, which lead to different scale atmospheric composition formation should be constructed in order to understand the atmospheric composition climate and air pollutants behaviour. On the basis of 3D modelling tools the extensive data base was created and this data was used for different studies of the atmospheric composition, carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data. All the simulations were based on the US EPA (Environmental Protection Agency) Model-3 system for the period of 7 years period (2008 to 2014). The modelling system consists of 3 models, meteorological pre-processor WRF, the emission pre-processor SMOKE and Chemical Transport Model (CTM) CMAQ.

Key words: *chemical and dynamical processes, ensemble of numerical simulation, contribution of different processes, atmospheric composition*

INTRODUCTION

An ensemble of the atmospheric composition over Sofia, taking to account the two-way interactions of different processes and track the main pathways and processes, which lead to different scale atmospheric composition formation is constructed. This ensemble is statistically robust enough in order to understand the atmospheric composition climate and air pollutants behaviour. The atmospheric composition climate modelling in Bulgaria results are published in many papers (Georgieva 2014), (Georgieva et al., 2015, 2017, 2018), (Georgieva and Ivanov, 2017), (Syrakov et al., 2013), (Gadzhev et al., 2013 a, b, 2014, 2015), but a detailed examination of the processes determining the atmospheric composition in urban areas have not yet been made and will be presented in the current paper for the capital of Bulgaria – Sofia.

The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each process for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal profiles is very useful for understanding the atmospheric composition, air pollutants origin and behaviour.

To analyse the contribution of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation over Sofia city special option of the model CMAQ “Integrated Process Rate Analysis” was applied. The procedure allows the concentration change for each compound to be presented as a sum of the contribution of each one of the processes, which determine the air pollution concentration.

METHODOLOGY

On the basis of 3D modelling tools the extensive data base was created and was used for different studies of the atmospheric composition. All the simulations were based on the USEPA Model-3 system consists of 3 models, meteorological model WRF (Weather Research and Forecasting model) (Shamarock et al. 2007), the emission pre-processor SMOKE (Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modelling System) (CEP, 2003) and Chemical Transport Model (CTM) CMAQ (Community Multiscale Air Quality System) (Byun et al., 1998), (Byun and Ching, 1999).

The meteorological background used in the study is the large scale data from the NCEP Global Analysis Data with $1^\circ \times 1^\circ$ horizontal grid resolution. The models nesting capabilities are used to downscale the simulations to a 1 km horizontal resolution for the city of Sofia. For emission input outside the Bulgaria, the TNO high resolution inventory is exploited with resolution $0.25^\circ \times 0.125^\circ$ longitude-latitude. The inventory is produced by proper disaggregation of the EMEP 50km inventory data base (Vestreng, 2001), (Vestreng et al., 2005). For Bulgaria the national emission inventory was also used. Special pre-processing procedures are created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions (Gadzhev et. all 2013a). The simulations are performed for 7 years period from 2008 to 2014. The Models-3 “Integrated Process Rate Analysis” option was applied to discriminate the role of different dynamic and chemical processes for the air pollution pattern formation: The procedure allows the concentration change for each compound for an hour (ΔC) to be presented as a sum of the contribution of the processes, which determine the concentration.

The processes accounted for in the model are horizontal diffusion (HDIF); horizontal advection (VADV); vertical diffusion (VDIF); vertical advection (VADV); dry deposition (DDEP); emissions (EMISS); chemical transformations (CHEM); aerosol processes (AERO); cloud processes (CLOUD). By integrating the transport and transformation equations the mean concentration change of i -th admixture in the first model layer for the time from t to $t + \Delta t$ Δc_i^1 can be presented as a sum of the contribution of the different processes:

$$\Delta c_i^1 = (\Delta c_i^1)_{hdif} + (\Delta c_i^1)_{vdif} + (\Delta c_i^1)_{hadv} + (\Delta c_i^1)_{vadv} + (\Delta c_i^1)_{drydep} + (\Delta c_i^1)_{emiss} + (\Delta c_i^1)_{chem} + (\Delta c_i^1)_{cloud} + (\Delta c_i^1)_{aero} \quad (1)$$

where
$$\Delta c_i^1 = \frac{1}{h_1} \int_0^{h_1} (c_i(t + \Delta t) - c_i(t)) dz \quad (2)$$

All the processes have different contribution, with different sign and have different meaning. The positive contribution means that this process increase the concentrations, the negative contributions means - decreasing of the concentration of selected item.

RESULTS

To analyse the contribution of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation over Sofia the CMAQ Integrated Process Rate Analysis option was applied. As already was stated above, the concentration change for each compound is presented as sum of the contribution of each process and in that way determine the concentration. The outputs were averaged over the whole 7-year, so the “typical” seasonal and annual evaluations were obtained, but, due to volume limitations only the annually averaged contributions of the processes to the concentration changes of Nitrogen and Sulphur dioxides (NO_2 and SO_2) at 06:00 GMT for Sofia are presented in the present paper.

The processes that lead to concentration change of Nitrogen and Sulphur dioxides are HADV, VADV, HDIF, VDIF, DDEP, CLDS, CHEM and EMISS (Figure 1 and 2). Always the contribution of the both HADV and VADV reflect very clearly the topography of the region. They are affected by local circulation systems. The mountain regions in the maps are very well displayed. The HADV and VADV contributions have always opposite signs, which is a manifestation of the atmosphere continuity equation.

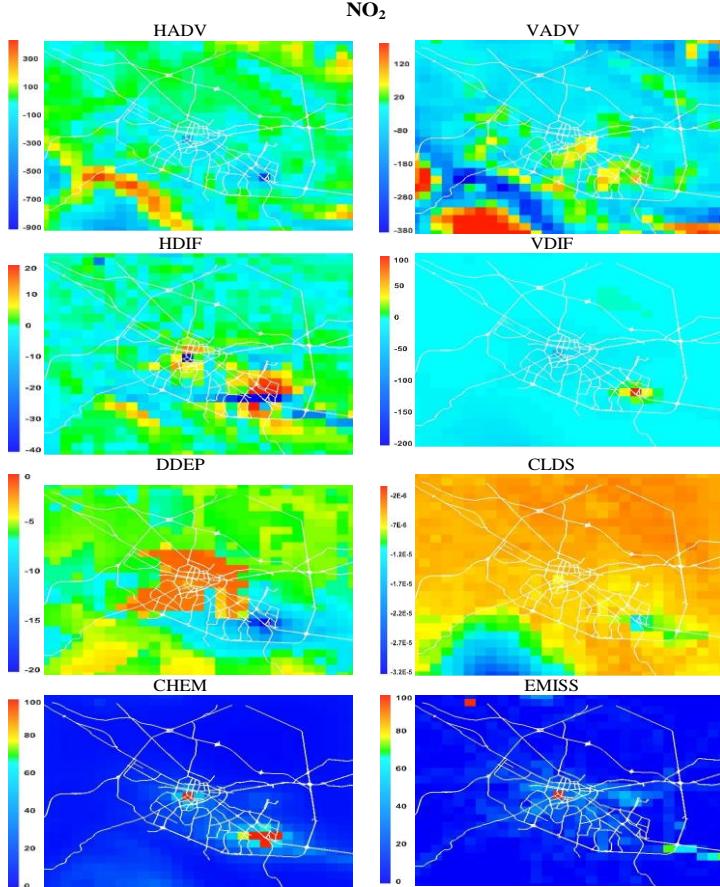


Figure 1: Annually averaged surface contributions of the different processes to the formation of NO_2 [$(\mu\text{g}/\text{m}^3)/\text{h}$] over territory of Sofia at 06:00 GMT.

For the NO_2 formation the HADV has maximal and positive contribution in the mountain foot, while over the mountains the contribution is negative. In that region (over Vitosha) the VADV has a contribution opposite to HADV - maximal and positive. Maximal positive HDIF contribution is over the mountains foot and close to the sources, while the maximal negative impact is under the large point sources – TPP Sofia in the city centre and TPP Iztok in the east part of the capital. The contribution of VDIF is positive in the morning hours, only under the TPP Iztok (transfer from the source to the ground level). The DDEP and CLDS contributions are negative with maximal values over the sources and mountains. The CHEM and EMISS have positive impact to the formation of NO_2 and the maximal values are over/under the sources. It is easy to follow where the big sources (TPPs Iztok and Sofia) and also the busiest road networks and autobahns are.

For the SO_2 formation the HADV has negative contribution over the mountains and under the sources of SO_2 . As the HADV is proportional to the wind and concentrations, the main sources of SO_2 are high sources and the concentrations below them are relatively low, so can be explained the small contribution of horizontal advection directly below the sources. The VADV contribution is opposite of the one of HADV – maximal and positive values are over the Vitosha and over the sources. The HDIF has negative impact in the city centre (palaces with high SO_2 concentrations). The VDIF is also with negative impact

in the city centre and positive in the mountain foot. The contributions of DDEP and CLDS are negative and have maximal values over the big sources of SO₂ in the city – TPP Sofia and TPP Iztok. The contribution of CHEM to the formation of SO₂ is really small and negative, mostly at the city centre. The impact of EMIS is strictly positive and maximum can be seen in the city centre.

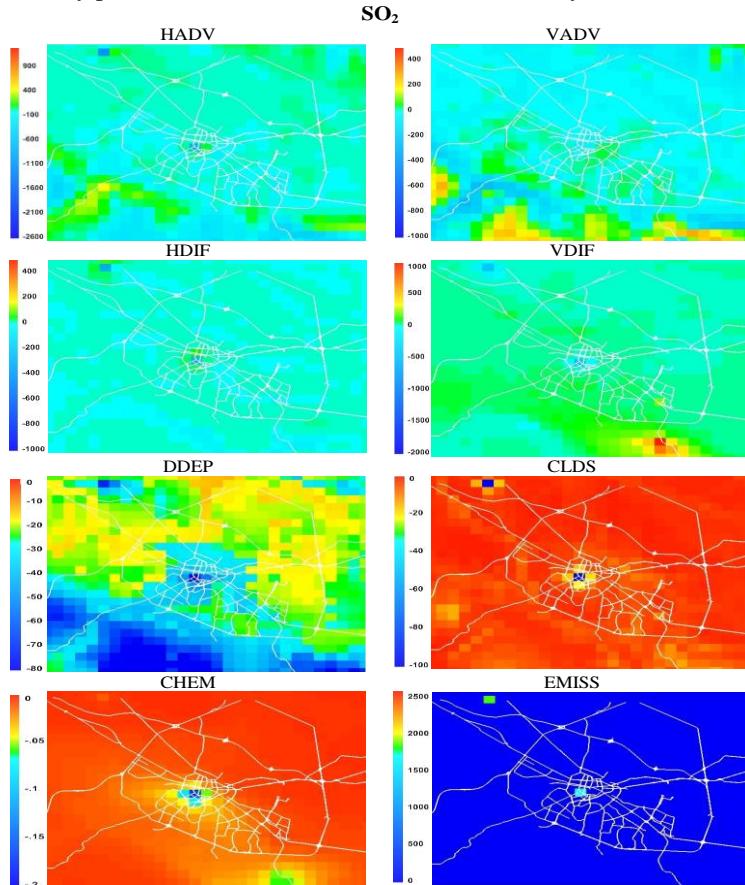


Figure 2: Annually averaged surface contributions of the different processes to the formation of SO₂ [$(\mu\text{g}/\text{m}^3)/\text{h}$] over territory of Sofia at 06:00 GMT.

CONCLUSIONS

The results produced by the CMAQ “Integrated Process Rate Analysis” demonstrate the very complex behaviour and interaction of the different processes. Further analysis of these processes, their spatial, diurnal and seasonal variability and interaction could be helpful for explanation of the overall picture and origin of the pollution in the considered region. For the whole domain of Sofia, and for each of the selected items, the total concentration change (ΔC) is determined mainly by a small number of dominating processes which have large values, and could be with opposite sign and phases. The total concentration change (ΔC) is a result of all the processes which may have large values with opposite sign and phases and that is why the (ΔC) could be positive, as well as negative and is different for each pollutant, the sign of the (ΔC) depending on the type of emissions, emission sources, as well as weather conditions and topography.

In general, it can be concluded that, the contributions of different processes have a different behaviour and interact in a very complex way.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work is supported by projects: The National Science Program "Environmental Protection and Reduction of Risks of Adverse Events and Natural Disasters", approved by the Resolution of the Council of Ministers № 577/17.08.2018 and supported by the Ministry of Education and Science (MES) of

Bulgaria (Agreement № DO-230/06-12-2018; and Bulgarian National Science Fund (grant DN-04/2/13.12.2016). Deep gratitude to the next organizations and institutes National Center for Environmental Prediction (NCEP) and National Center for Atmospheric Research (NCAR), The European Monitoring and Evaluation Programme (EMEP) and The Netherlands Organization for Applied Scientific Research (TNO) for providing free-of-charge data and software, the high-resolution European anthropogenic emission inventory and all others.

REFERENCES

- Byun, D., Young J., Gipson G., Godowitch J., Binkowski F.S., Roselle S., Benjey B., Pleim J., Ching J., Novak J., Coats C., Odman T., Hanna A., Alapaty K., Mathur R., McHenry J., Shankar U., Fine S., Xiu A., and Jang C., 1998: Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, 264-268.
- Byun, D. and Ching, J., 1999: Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. U.S. Environmental Protection Agency, Washington, D.C., EPA/600/R-99/030 (NTIS PB2000-100561), 1999.
https://cfpub.epa.gov/si/si_public_record_report.cfm?Lab=NERL&dirEntryId=63400
- CEP, 2003: Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., 2013a: Numerical Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, Computers and Mathematics with Applications **65**, 402-422.
- Gadzhev G., Ganev K., Prodanova M., Syrakov D., Miloshev N., 2013b: Some statistical evaluations of numerically obtained atmospheric composition fields in Bulgaria, Proceedings of the 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes.
- Gadzhev G., Ganev K., Miloshev N., Syrakov D., and Prodanova M., 2014: Analysis of the Processes Which Form the Air Pollution Pattern over Bulgaria: LSSC 2013, LNCS **8353**, 390–396, © Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., 2015: HPC simulations of the fine particulate matter climate of Bulgaria, Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 178-186.
- Georgieva, I., 2014: Study of the air quality index climate for Bulgaria, Proc. of the international conference on numerical methods for scientific computations and advanced applications, May 19-22, 2014, Bansko, 39-42.
- Georgieva I., Gadzhev G., Ganev K., Prodanova M., Syrakov D., Miloshev N., 2015: Numerical study of the air quality in the city of Sofia – some preliminary results, International Journal of Environment and pollution, **57**, Nos. 3/4, 162-174. <https://doi.org/10.1136/jech.2009.087999>
- Georgieva I., Gadzhev G., Ganev K., Melas D., Wang T., 2017: High Performance Computing Simulations of the Atmospheric Composition in Bulgaria and the City of Sofia, Cybernetics And Information Technologies, **17**, No5,37-48.
- Georgieva I., Gadzhev G., Ganev K., Miloshev N., 2018: Analysis of dynamical and chemical processes which form atmospheric composition over Bulgaria, Proc. of the SGEM VIENNA GREEN 2018, **4.3,18**, issue **4.3**, 167-179. DOI:10.5593/sgem2018/4.3, pp167-179.
- Georgieva I and Ivanov V., 2017: Air Quality Index Evaluations for Sofia city Proc. of the 17th IEEE International Conference on Smart Technologies IEEE EUROCON 2017, 6-8.07.2017, 920-925.
- Shamarock, W.C., Joseph B., Dudhia J., Gill Dale M., Wang W., Jordan G., 2007: A Description of the Advanced Research WRF Version 2. <http://www.dtic.mil/dtic/tr/fulltext/u2/a487419.pdf>
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., 2013: Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to Sofia city, American Institute of Physics, Conf. Proc. **1561**, 120-132.
- Vestreng V., 2001: Emission data reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the spatial distribution of emissions. Meteorological Synthesizing Centre - West, The Norwegian Meteorological Institute, Oslo, Norway, Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1.
- Vestreng V., Breivik K., Adams M., Wagner A., Goodwin J., Rozovskaya O., Pacyna J.M., 2005: Inventory Review 2005 (Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive), Technical Report MSC-W 1/2005, EMEP.

Ivan Lirkov
Svetozar Margenov (Eds.)

LNCS 11958

Large-Scale Scientific Computing

12th International Conference, LSSC 2019
Sozopol, Bulgaria, June 10–14, 2019
Revised Selected Papers



Springer

Founding Editors

Gerhard Goos

Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Germany

Juris Hartmanis

Cornell University, Ithaca, NY, USA

Editorial Board Members

Elisa Bertino

Purdue University, West Lafayette, IN, USA

Wen Gao

Peking University, Beijing, China

Bernhard Steffen

TU Dortmund University, Dortmund, Germany

Gerhard Woeginger

RWTH Aachen, Aachen, Germany

Moti Yung

Columbia University, New York, NY, USA

More information about this series at <http://www.springer.com/series/7407>

Ivan Lirkov · Svetozar Margenov (Eds.)

Large-Scale Scientific Computing

12th International Conference, LSSC 2019
Sozopol, Bulgaria, June 10–14, 2019
Revised Selected Papers

Editors

Ivan Lirkov 
Bulgarian Academy of Sciences
Sofia, Bulgaria

Svetozar Margenov 
Bulgarian Academy of Sciences
Sofia, Bulgaria

ISSN 0302-9743

Lecture Notes in Computer Science

ISBN 978-3-030-41031-5

<https://doi.org/10.1007/978-3-030-41032-2>

ISSN 1611-3349 (electronic)

ISBN 978-3-030-41032-2 (eBook)

LNCS Sublibrary: SL1 – Theoretical Computer Science and General Issues

© Springer Nature Switzerland AG 2020

This work is subject to copyright. All rights are reserved by the Publisher, whether the whole or part of the material is concerned, specifically the rights of translation, reprinting, reuse of illustrations, recitation, broadcasting, reproduction on microfilms or in any other physical way, and transmission or information storage and retrieval, electronic adaptation, computer software, or by similar or dissimilar methodology now known or hereafter developed.

The use of general descriptive names, registered names, trademarks, service marks, etc. in this publication does not imply, even in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protective laws and regulations and therefore free for general use.

The publisher, the authors and the editors are safe to assume that the advice and information in this book are believed to be true and accurate at the date of publication. Neither the publisher nor the authors or the editors give a warranty, expressed or implied, with respect to the material contained herein or for any errors or omissions that may have been made. The publisher remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

This Springer imprint is published by the registered company Springer Nature Switzerland AG
The registered company address is: Gewerbestrasse 11, 6330 Cham, Switzerland



Process Analysis of Atmospheric Composition Fields in Urban Area (Sofia City)

Ivelina Georgieva^(✉), Georgi Gadzhev, Kostadin Ganев, and Nikolay Miloshev

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography,
Bulgarian Academy of Sciences, Acad. G. Bonchev Street, bl. 3, 1113 Sofia, Bulgaria
iivanova@geophys.bas.bg

Abstract. The air pollution pattern is formed as a result of interaction of different processes, so knowing the contribution of each one of the processes for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal profiles could be helpful for understanding the atmospheric composition and air pollutants behavior. Analysis of the contribution of these different processes (chemical and dynamical) which form the atmospheric composition in chosen region will be demonstrated in the present paper. To analyze the contribution of different dynamic and chemical processes for the air pollution formation over Sofia the CMAQ Integrated Process Rate Analysis option was applied. The procedure allows the concentration change for each compound to be presented as a sum of the contribution of each one of the processes, which determine the air pollution concentration. A statistically robust ensemble of the atmospheric composition over Sofia, taking into account the two-way interactions of local to urban scale and tracking the main pathways and processes, which lead to different scale atmospheric composition formation should be constructed in order to understand the atmospheric composition climate and air pollutants behavior.

On the basis of 3D modeling tools an extensive data base was created and this data was used for different studies of the atmospheric composition, carried out with good resolution using up-to-date modeling tools and detailed and reliable input data. All the simulations were based on the US EPA (Environmental Protection Agency) Model-3 system for the 7 years period (2008 to 2014). The modeling system consists of 3 models, meteorological pre-processor, the emission pre-processor SMOKE and Chemical Transport Model (CTM) CMAQ.

Keywords: Air pollution modeling · Dynamical and chemical processes · Ensemble of numerical simulation · Atmospheric composition · Process analysis

1 Introduction

An ensemble of the atmospheric composition over Sofia, taking to account the two-way interactions of different processes and track the main pathways and

Air Pollution Assessment for Sofia City - Dominant Pollutants Recurrence Which Determines the air Quality Status

I. Georgieva¹

¹ National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography

Summary

On the basis of 3D modelling tools, the extensive database was created and used for studies of the atmospheric composition, carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data. The simulations are carried out in the frame of The Bulgarian Chemical Weather Forecast and Information System (BgCWFIS), based on the US EPA Model-3 system. On this basis a statistically significant ensemble of Air Quality indexes (AQI) was calculated, and their typical recurrence, space and temporal variability was constructed.

The numerical experiments with a horizontal resolution of 1 km. for Sofia city are going on. The AQ impact on human health is evaluated in the terms of AQI, which give an integrated assessment of the impact of pollutants and directly measuring the effects of air quality. All the evaluations are on the basis of air pollutants concentrations obtained from the numerical modelling and make it possible to reveal the AQI status spatial/temporal distribution and behaviour.

The results presented in this paper, allow to estimate the highest recurrence of the indices for the whole ensemble annually, and to analyse the possible reason for high values in different bands and different AQI statuses.



Introduction

Systems for Chemical Weather Forecast operate in many European countries, including Bulgaria - The Bulgarian Chemical Weather Forecast and Information System (BgCWFIS). BgCWFIS runs on five nested domains, reaching space resolution of 1 km for the territory of interest - Sofia City. The BgCWFIS calculates the Air Quality Index (AQI) which directly measures the effects of air quality (AQ) on human health. The outputs of BgCWFIS create ensemble big, exhaustive and representative enough, to allow making reliable conclusions for the atmospheric composition, including the AQI, status and behavior. The analysis of the results from BgCWFIS about AQI is the main objective of the present work.

Method

The AQI evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ in Sofia, made in the frame of the BgCWFIS delivers AQ forecasts on an hourly basis. Detailed description of the operational performance of BgCWFIS, computation of AQI, domains and input data is given in many papers and previous work in Bulgaria (Gadzhev et al., 2011, 2012, 2013a, 2014a, 2014b, 2015, 2018, 2020, 2021).

The AQI calculated in the system is on the basis of UK Daily Air Quality Index (de Leeuw, and Mol, 2005) and according to it 5 main pollutants: O₃, NO₂, SO₂, CO and PM₁₀ are used. (Ivanov and Georgieva, 2017, Georgieva and Ivanov, 2018, Georgieva et al., 2015, 2017, 2018). The further considerations in the paper are made on the basis of long term AQ simulations, which make it possible to reveal the climate of AQI spatial/temporal distribution and behavior. The AQI is defined in several segments, different for each considered pollutant, with different averaging periods for different pollutants. The breakpoints between index values are defined for each pollutant separately. For each particular case the concentration of each pollutant falls into one of the bands, (de Leeuw, and Mol, 2005). Thus the AQI for each pollutant is determined. The overall index describes air pollution on the basis of the pollutant, which AQI falls into the highest. The pollutant, which determines the overall AQI for the given particular case is referred to as "dominant pollutant".

Results

Some results, illustrating the spatial and diurnal variability of the different AQI and respective "dominant pollutant annual recurrences are presented in the figure (Fig.1 – Fig.3). They are calculated on the basis of the ensemble for the entire selected period 2008-2020.

Figure 1 represents the spatial and diurnal variation of the annual recurrence (%) of AQI bands for selected hours. In the Low band the air is cleanest, so high recurrence values mean more cases with clean air and lower recurrence values mean less cases with clean air or worse AQ status. The recurrence of Low band is about 90% over the whole city during the whole day. That means that most of the cases fall in this band, and the rest from 90% to 100% are distributed to other bands – Moderate, High and Very High. For Moderate band high recurrence can be seen over the Vitosha mountain about 5% in morning and afternoon hours, and 6% at the centre of the city. The behavior of the surface ozone is complex. The O₃ in Bulgaria is to a great extent due to transport from abroad (Gadzhev et al, 2013b). This is the reason why the O₃ concentrations early in the morning are smaller (less intensive transport from higher levels), and higher at noon and afternoon. At noon the cases with bad AQ reach 5% over the whole territory of the city. For High and Very High bands, the plot shows a small recurrence of about 4-6% in the morning and afternoon in 3 spots of the city - the city center, the area of the airport and Kostinbrod.

The next plots present the recurrence of cases in which O₃ or PM₁₀ is the dominant pollutant that determines the respective AQI band. The recurrence of cases for which O₃ determines the formation of

each band can be seen in Figure 2. The O₃ recurrence as a dominant pollutant for the Low band is near 20% over the whole city. For the Moderate band the O₃ recurrence is 100% for the whole domain, except in the morning and afternoon. In morning hours the 100% recurrence can be seen only over the Vitosha Mountain, while in the city center the recurrence of cases is due to other pollutants. In the afternoon the O₃ recurrence covers already the rural area of the city. From this behavior of O₃ recurrence it can be concluded that it determines the formation of indices for Low and Moderate range. For the other bands the O₃ contribution has a zero recurrence and so the AQI value is due to other pollutants.

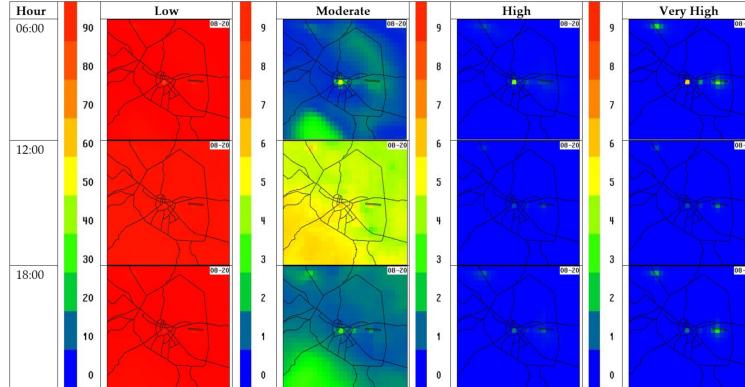


Figure 1 Annual recurrence of AQI bands (%) over Sofia city for the period 2008-2020 for selected hours 06:00, 12:00 and 18:00 UTC.

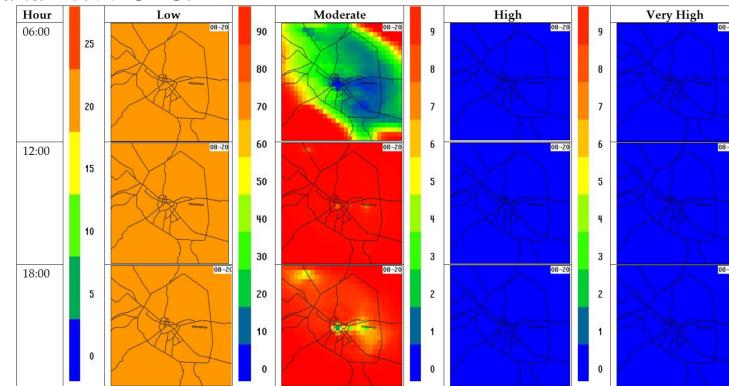


Figure 2 Annual recurrence (%) of the cases in which the O₃ dominates in the formation of AQI bands over Sofia city for the period 2013-2020 for selected hours 06:00, 12:00 and 18:00 UTC.

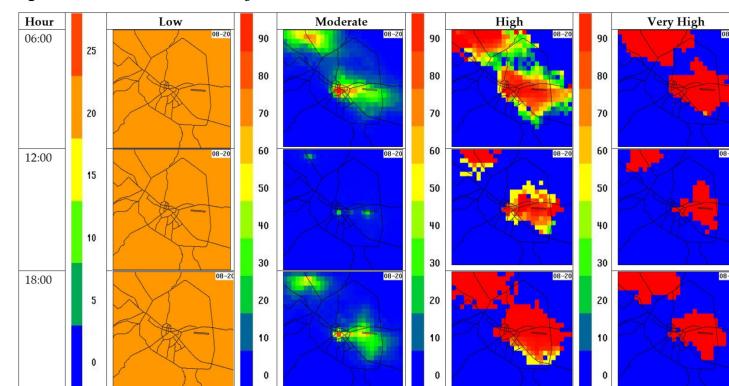


Figure 3 Annual recurrence (%) of the cases in which the PM₁₀ dominates in the formation of AQI bands over Sofia city for the period 2013-2020 for selected hours 06:00, 12:00 and 18:00 UTC.

Figure 3 presents the recurrence of cases for which PM₁₀ determines the formation of the indices. In the plots for Low band the recurrence of PM₁₀ dominance is about 20%. For Moderate band the recurrence in the city center is about 90% and 40% in the surroundingng area, in morning and afternoon hours. The recurrence of PM₁₀ dominance in formation of High and Very High bands is



about 100% during the whole day and covers the centre of the city, the Kostinbrod area and the Sofia airport area.

Conclusions

AQI status of the city of Sofia falls mostly into Low and Moderate bands. The recurrence of cases with High pollution is close to 10% mostly in the city center. The recurrence of Low band does not have significant spatial/temporal variability and most of the cases fall in this band. The recurrence is about 80-90% over the whole city. The Moderate band in the morning and afternoon hours has high recurrence over the Vitosha Mountain. At noon the cases with Moderate AQ reach 5% over the whole territory of the city. The Very High band, shows recurrence of about 5-7% in morning and afternoon in 3 spots of the city -- the city center, the area of the airport and Kostinbrod.

The results for recurrence of different pollutants dominance to the formation of each index shows that both O₃ and PM₁₀ dominance recurrence for Low band is near 20% over the whole city O₃ is generally responsible (dominant) for the formation of Moderate band AQI, while the formation of AQI in High and Very High bands is exclusively due to PM₁₀. The dominance of PM₁₀ for formation of others bands High and Very High is about 100% during the whole day and covers the center of the city, the Kostinbrod area and the Sofia airport. This is normal having in mind that in these areas are situated the main PM₁₀ sources like TPPs, manufactures and the busiest traffic network.

Apart from these general features the climatic behavior of the AQI probabilities is rather complex with significant spatial, seasonal and diurnal variability. The areas with slightly worse AQ status are not necessarily linked to the big pollution sources. Wide rural and even mountain regions can also have a significant probability for AQI from the Moderate range.

Acknowledgements

This work has been carried out in the framework of the National Science Program "Environmental Protection and Reduction of Risks of Adverse Events and Natural Disasters", approved by the Resolution of the Council of Ministers № 577/17.08.2018 and supported by the Ministry of Education and Science (MES) of Bulgaria (Agreement № Д01-363/17.12.2020) and of the National Science Program "Young scientists and postdoctoral students", approved by the Resolution of the Council of Ministers № 577/17.08.2018 and supported by the Ministry of Education and Science (MES) of Bulgaria.

References

- Gadzhev, G., Jordanov, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Miloshev, N., [2011]. Atmospheric composition studies for the Balkan Region. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 6046 LNCS, 150-157. DOI: 10.1007/978-3-642-18466-6_17
- Gadzhev, G., Ganev, K., Syrakov, D., Miloshev, N., Prodanova, M., [2012] Contribution of biogenic emissions to the atmospheric composition of the Balkan Region and Bulgaria. *International Journal of Environment and Pollution*, 50 (1-4), 130-139. DOI: 10.1504/IJEP.2012.051187
- Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Atanasov, E., Miloshev, N. [2013a]. Multi-scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security*, 137, 381-385. DOI: 10.1007/978-94-007-5577-2_64
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M.: Numerical, [2013b]. Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, *Computers and Mathematics with Applications* 65, 402-422.



Gadzhev, G., Ganев, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., [2014a]. Analysis of the processes which form the air pollution pattern over Bulgaria, *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 8353 LNCS, 390-396.

Gadzhev, G., Ganев, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M., [2014b]. Some basic facts about the atmospheric composition in Bulgaria - Grid computing simulations, *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 8353 LNCS, 484-490.

Gadzhev, G., Ganев, K., Miloshev, N., [2015]. Numerical study of the atmospheric composition climate of Bulgaria - Validation of the computer simulation results, *International Journal of Environment and Pollution*, 57 (3-4), 189-201.

Gadzhev, G., [2018]. Recurrence of Air Quality for the city of Sofia for 2013 and 2014, *Bulgarian Geophysical Journal*, 41, 46–58.

Gadzhev, G., [2020]. Preliminary results for the recurrence of air quality index for the city of Sofia from 2008 to 2019, *Proceeding of 1st International conference on ENVIRONMENTAL protection and disaster RISKS*, 29-30 September 2020, Sofia, Bulgaria, ISBN 978-619-7065-38-1, 53 – 64, <https://doi.org/10.48365/envr-2020.1.5>

Gadzhev, G., [2021]. The Seasonal Recurrence of Air Quality Index for the Period 2008-2019 Over the Territory of Sofia City, Dobrinkova and G. Gadzhev (eds.), *Environmental Protection and Disaster Risks, Studies in Systems, Decision and Control* 361, 161–170, https://doi.org/10.1007/978-3-030-70190-1_11

Georgieva, I.; Gadzhev, G.; Ganев, K.; Prodanova, M.; Syrakov, D.; Miloshev, N., [2014]. Numerical study of the air quality in the city of Sofia - Some preliminary results, *HARMO 2014 - 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Proceedings*, 356-360.

Georgieva I.; Gadzhev G.; Ganev K.; Prodanova M.; Syrakov D.; Miloshev N., [2015]. Numerical study of the air quality in the city of Sofia – some preliminary results, *International Journal of Environment and pollution*, 57, 162-174.

Georgieva, I.; Gadzhev, G.; Ganev, K.; Miloshev, N., [2018]. Computer simulations of atmospheric composition in urban areas some results for the city of Sofia., *Proceedings of the Tenth International Conference on "Large Scale Scientific Computations"*, LSSC2018, Sozopol, Bulgaria, June 5-9 2017, LNCS10665, 474–482.

Georgieva, I.; Ivanov, V., [2018]. Computer simulations of the impact of air pollution on the quality of life and health risks in Bulgaria. *International Journal of Environment and Pollution*, 64, 35-46.

Ivanov, V.; Georgieva, I., [2017]. Air quality index evaluations for sofia city. In *17th IEEE International Conference on Smart Technologies, Proceedings of EUROCON 2017*, Ohrid, North Macedonia, 2017

Leeuw, F. de, Mol, W., [2005]. Air Quality and Air Quality Indices: a world apart. *ETC/ACC Technical Paper 2005/5* http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACCTechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf



Article

Basic Facts about Numerical Simulations of Atmospheric Composition in the City of Sofia

Vladimir Ivanov * and Ivelina Georgieva

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences, Acad. G. Bonchev Str., Bl. 3, 1113 Sofia, Bulgaria; iivanova@geophys.bas.bg

* Correspondence: vivanov@geophys.bas.bg; Tel.: +359-29793328

Abstract: The atmospheric composition in urban areas is one of the primary tasks in air pollution studies. The research aims to provide a statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of the city of Sofia—typical and extreme features of the special/temporal behavior, annual means, seasonal and diurnal variations. For that purpose, extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Sofia city have been performed. Three models were chosen as modeling tools. We used WRF as a meteorological pre-processor, CMAQ as a chemical transport model, and SMOKE as the emission pre-processor of Models-3 system. We developed the following conclusions. The daily concentration changes of the two essential air pollution species—nitrogen dioxide (NO_2) and fine particle matters (FPRM, particulate matter ($\text{PM}_{2.5}$), which has a diameter between 0 and 2.5 micrometers)—have different magnitudes. Second, the emissions relative contributions to the concentration of different species could be different, varying from 0% to above 100%. The contributions of different emission categories to other species surface concentrations have various diurnal courses. Last, the total concentration change (ΔC) is different for each pollutant. The sign of the contributions of some processes is evident. Still, some may have different signs depending on the type of emissions, weather conditions, or topography.



Citation: Ivanov, V.; Georgieva, I. Basic Facts about Numerical Simulations of Atmospheric Composition in the City of Sofia. *Atmosphere* **2021**, *12*, 1450. <https://doi.org/10.3390/atmos12111450>

Academic Editors: Elena Hristova, Manousos Ioannis Manousakas, Anikó Angyal and Maria Gini

Received: 30 September 2021
Accepted: 28 October 2021
Published: 2 November 2021

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2021 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

The atmospheric composition in urban areas is one of the primary tasks in air pollution studies. The air pollution climate in urban areas has not been systematically studied yet in Bulgaria, but some air pollution modeling for the city of Sofia had been performed, and air pollution forecast for the city is operationally occurring [1–5]. Recently, extensive studies for long enough simulation periods and reasonable resolution of the atmospheric composition status in Bulgaria have been carried out using up-to-date modeling tools and detailed and reliable input data [6–25]. The next step in studying the atmospheric composition climate is performing simulations on an urban scale. Research works dealing with this topic include domains with different sizes and scales from meters to kilometers [26–34]. The models' simulations in the smallest scales usually deal with sub-urban-sized areas as streets and neighborhoods. The simulations aim to construct an ensemble comprehensive enough to provide a statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate of the city of Sofia—typical and extreme features of the special/temporal behavior, annual means, seasonal and diurnal variations, etc. Some evaluations of the contribution of different pollution sources and dynamic and chemical processes to the atmospheric composition of the city of Sofia will be presented in the paper.

Methodology: Extensive numerical simulations of the atmospheric composition fields in Sofia city have been recently performed, and an ensemble, comprehensive enough as to provide a statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate, was

constructed. The US EPA Models-3 system was chosen as a modeling tool. WRF [35] used as meteorological pre-processor, CMAQ—the Community Multiscale Air Quality System [36,37], being the Chemical Transport Model (CTM) of the system, and SMOKE—the Sparse Matrix Operator Kernel Emissions Modeling System [38]—the emission pre-processor of Models-3 system.

As the NCEP Global Analysis Data with one-degree resolution is used as meteorological background, the system nesting capabilities were applied for downscaling the simulations to a 1 km resolution (Figure 1). Results for the Sofia city domain (D5) and two locations—Orlov most and Bistritsa—are presented in this paper. Orlov most is located in the center of the city and represents a typical urban-polluted site. Bistritsa is located on the semi-mountain outskirts and represents a rural site of the domain.

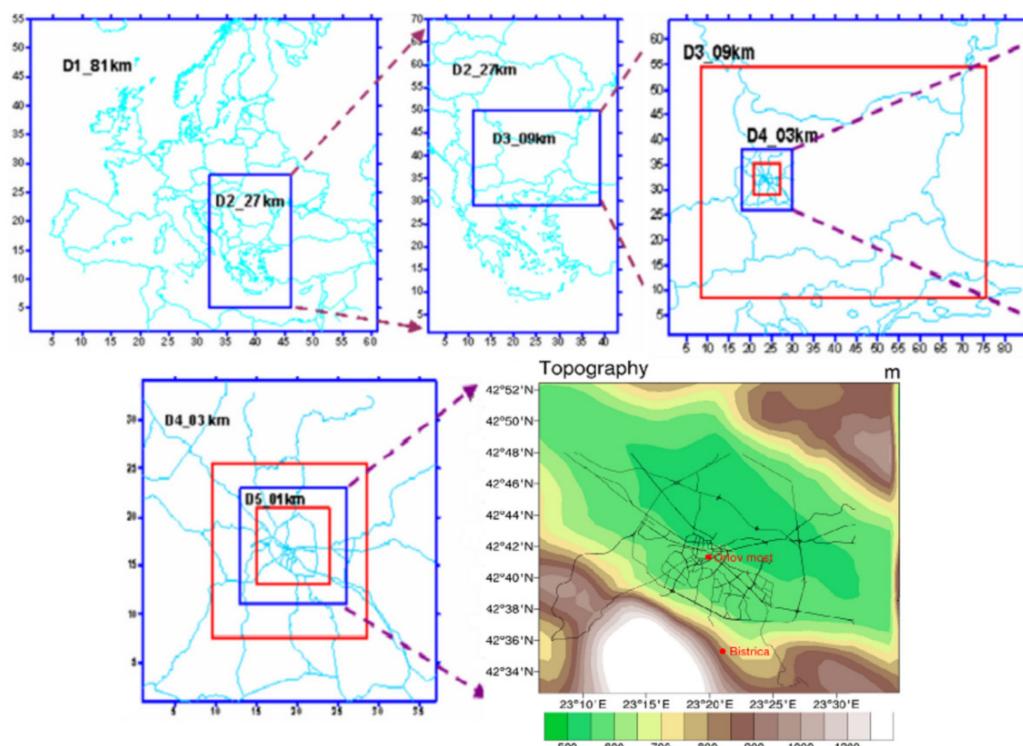


Figure 1. Five computational domains (CMAQ domains are nested in WRF ones)—D1 81×81 km (Europe), D2 27×27 km (Balkan Peninsula), D3 9×9 km (Bulgaria), D4 3×3 km (Sofia municipality) and D5 1×1 km (Sofia city).

The TNO inventory with resolution $0.25^\circ \times 0.125^\circ$ in 10 SNAP categories for 2010 [39–41] is exploited for the territories outside Bulgaria in the mother CMAQs domain. For the Bulgarian domains, the National inventory for 2010 as provided by Bulgarian Executive Environmental Agency is used. All simulations were performed for a 7-year period from 2008 to 2014 with two-way nesting mod on. Special pre-processing procedures were created for introducing temporal profiles and speciation of the emissions [42].

The study is based on a large number of numerical simulations carried out daily for all periods. Different characteristics of the numerically obtained concentration fields and for five emission scenarios, with all the emissions included and reduced of factor 0.8, including emissions from energetics, non-industrial and industrial combustions, and road transport, will be demonstrated in the present paper. Results concerning the contribution of the different emission categories are demonstrated. The air pollution pattern is also formed as a result of the interaction of different processes; thus, knowing the contribution of each one of these processes for different meteorological conditions and given emission spatial configuration and temporal profiles is useful for understanding the atmospheric composition and air pollutants origin and behavior. To analyze the contribution of different

dynamic and chemical processes, the CMAQ “integrated process rate analysis” option was applied. The procedure allows the concentration change for each compound to be presented as a sum of the contribution of each one of the processes, which determines the air pollution concentration.

2. Materials and Methods

The sample size of the 7-year simulation is large and comprehensive enough to allow processing a variety of statistical quantities. We can calculate different statistics for the entire Sofia city domain, as well as for chosen locations—dispersion, the absolute minimum and maximum concentrations, a percent of the averages in the given interval of values, the probability density function, skewness, kurtosis, etc.

We present plots for the main statistical characteristics of the ensemble characteristics of the air pollution, namely seasonal and annual ones for some pollutants NO₂ (nitrogen dioxide) and FPRM (fine particulate matter), averaged for the Sofia city region and in two locations in the city—Orlov most (point situated at the city center) and Bistrica (situated at semi-mountain outskirts). The plots give graphics of mean concentrations, maximum ones for entire simulation (period/ensemble), and curves noted as 10%, 25%, 75%, and 90%, for the 10th, 25th, 75th, and 90th percentile, respectively. The resulting curves suggest that 50% of the cases fall into the 25–75% interval, and 80% of the cases fall into the 10–90% interval. The plotted curves give a good enough idea for the statistical characteristics of the ensemble—dispersion, asymmetry, excess kurtosis, without being shown explicitly. The axes are given in logarithmic scale due to the high absolute minimal concentrations and the impossibility to distinguish the intervals of cases with different concentrations from the absolute ones on one plot. The absolute minimum concentrations are close to zero in most of the cases; thus, they are not shown on the logarithmic plots.

As already stated, the simulated fields ensemble is large enough to allow statistical treatment. In particular, the probability density functions for each of the atmospheric compounds can be calculated, with the respective seasonal and diurnal variations, for each of the points of the simulation grid or averaged over the territory of the city. Knowing the probability density functions means knowing everything about the ensemble. An example of spatial and diurnal variations of the annual ensembles of surface NO₂ and FPRM behaviors ate two locations, the typically urban site “Orlov most” and “Bistritsa”, are shown in the paper.

The emission inventory, used in the simulations, includes 10 emission categories (SNAP categories) and allows the evaluation of the contribution of various anthropogenic activities to the overall picture of air pollution in the city of Sofia:

1. SNAP 1 (Combustion in energetics) reduced with factor 0.8;
2. SNAP 2 (Non-industrial combustion plants) reduced with factor 0.8;
3. SNAP 3 (Combustion in manufacturing industry) reduced with factor 0.8;
4. Production processes;
5. Extraction and distribution of fossil fuels;
6. Solvent and other product use;
7. SNAP 7 (Road transport) reduced with factor 0.8;
8. Other mobile sources and machinery;
9. Waste treatment and disposal;
10. Agriculture.

The used SNAP categorization of emissions, reduced by some factor, allows evaluation of the contribution of road transport, energetic, industrial, and non-industrial combustions to the atmospheric composition in the city. The concentrations for each scenario of reduced SNAP’s were calculated for each day of the period, and the relative contribution of the emissions for each of the scenarios was calculated in the following way.

If an arbitrary pollution characteristic (concentration, deposition, process contribution, etc.) for a given grid point, or averaged over chosen domain, obtained with all the emissions accounted for, is denoted by ϕ , then ϕ_m is the respective characteristic obtained when the

emissions from source category m is reduced by a factor of α . In such a case, the quantity φ_m can be interpreted as the relative (in %) contributions of emission category m to the formation of the characteristic ϕ :

$$\varphi_m = \frac{1}{1 - \alpha} \frac{\phi - \phi_m}{\phi} \cdot 100 \quad (1)$$

More than one selected nomenclature for sources of air pollution (SNAP) category emissions can be reduced by a factor of α , and thus the joint contribution of several or all SNAP categories to the formation of the pollution characteristic ϕ can be evaluated. Obtained relative source contributions can also be averaged for the entire ensemble, thus providing the “climate” of the emission contributions, in particular the “typical” annual and seasonal contributions.

The reason why the emissions from a given category are reduced by a chosen factor and not simply at zero is that by completely removing the emissions from a given category, we can obtain much smaller concentrations, which may change the rate of some nonlinear chemical reactions. Moreover, the significant reduction of the concentrations may change the compound diffusion through the domain boundaries, which is why it is a general practice for the simulations to evaluate the contribution of emissions from a given category to be performed as applied and not removed, but reduced emissions from this category, which is normally performed in such studies. The reduction of 20% is preferred by many authors in atmospheric pollution studies.

Five emission scenarios will be considered here: Simulations with all the emissions included and with the emissions from all the SNAP categories (SNALL), SNAP categories 1 (energetics—SN1), SNAP categories 2 (non-industrial combustions—SN2), SNAP categories 3 (industrial combustions—SN3) and SNAP categories 7 (road transport—SN7) for Sofia reduced by a factor of 0.8. This makes it possible to evaluate the contribution of all the emissions, as well as the emissions from road transport, energetics, industrial and non-industrial combustions to the atmospheric composition in the city. The relative contribution of the emissions for each scenario was calculated for each day of this 7-year period, and then, by averaging over the ensemble, the typical fields of relative contributions of these emissions to the surface concentrations of each of the compounds were calculated for the four seasons and annually. For all the emission categories, the pattern of the contribution fields is complex, which reflects the emission source configuration, the heterogeneity of topography, land use, and meteorological conditions. In order to demonstrate the emission contribution behavior in a simpler and easy to comprehend way, the respective fields can be averaged over some domain, which makes it possible to follow and compare the diurnal behavior of the respective contributions for different species. Graphics of the diurnal evolution of the “typical” relative contribution annually and seasonal emissions of SNAP categories 1, 2, 3, 7 and all the emissions to the surface concentrations of NO_2 , FPRM, averaged for the territory of Sofia city and for Orlov most and Bistritsa, are shown in figures.

Atmospheric pollution is a result of the interaction of different dynamic and chemical processes. The consideration of the interaction and contribution of these processes provides a possibility for an explanation of the entire picture of the air pollution in Sofia city. The processes that influence the formation of the air pollution patterns are HADV—horizontal advection, ZADV—vertical advection, HDIF—horizontal diffusion, VDIF—vertical diffusion, EMIS—emissions, DDEP—dry deposition, CLDS—cloud processes, CHEM—chemical processes, and AERO—aerosol processes. In the current section, we present mainly results from the high-performance computing simulations, which evaluate the contribution of different dynamic transportation and transformation processes of air pollutants, which form the air pollution climate in Sofia city. The function of the CMAQ model—“integrated process rate analysis” was used for this task—a specific option that gives an opportunity to estimate the role of each one of the former processes in air pollution formation. In that way, the concentration change ΔC_i of the i -th pollutant for a given time interval from t to $[t + \Delta t]$,

can be present as a sum of the contributions of the different processes that determine the concentration change, i.e., the equation for transport and transformation of pollutants can be written in the form:

$$\Delta c_i^1 = (\Delta c_i^1)_{hdif} + (\Delta c_i^1)_{vdif} + (\Delta c_i^1)_{h\ adv} + (\Delta c_i^1)_{v\ adv} + (\Delta c_i^1)_{drydep} + (\Delta c_i^1)_{emiss} + (\Delta c_i^1)_{chem} + (\Delta c_i^1)_{cloud} + (\Delta c_i^1)_{aero} \quad (2)$$

The figures show the annual and seasonal averaged contributions of the HADV, ZADV, HDIF, VDIF, EMIS, DDEP, CLDS, CHEM, AERO leading to the different air pollutants (NO_2 , FPRM) formations, averaged for some locations of the domain, as well as for the entire one—Sofia city. All the plots demonstrated are for the first model layer. The total change of the concentration (ΔC) is also plotted, and we can see its sign—positive or negative and that it has a well pronounced diurnal course. Different contributions with different values dominate the formation of the air pollutants, which is traced on the graphics and which contribution of given processes dominate, in a given time and sign.

3. Results

The Section 3 is separated into three parts and presents characteristics of the numerically obtained concentration fields, the contribution of different emission sources, and process analysis of the atmospheric composition for the entire domain Sofia city and two locations—Orlov most and Bistritsa.

Graphics of the diurnal evolution of the “typical” relative contribution—annual and seasonal emissions—of SNAP categories 1, 2, 3, 7 and the emissions of the surface concentrations of NO_2 and FPRM, averaged for the territory of Sofia city and for Orlov most and Bistritsa, are shown.

The annual and seasonal averaged contributions of the processes leading to the formation of pollutants (NO_2 , FPRM), averaged for some locations of the domain as well as for the entire Sofia city, are presented. The total change of the concentration (ΔC) is also plotted, and we can see its sign—positive or negative—has a well pronounced diurnal course. Different contributions with different values dominate the formation of the air pollutants, which is traced on the graphics—where a given process dominates, at a given time and sign. The values of ΔC differ in different seasons and are defined from the superposition of the contributions of the different processes, which are also with a different signs.

3.1. Characteristics of the Numerically Obtained Concentration Fields, Contribution of Different Emission Sources and Different Dynamic and Chemical Processes to the Atmospheric Composition in Sofia

The graphics in Figure 2 show that the average NO_2 concentrations have a well-expressed diurnal course with a maximum in the early hours and a minimum in the afternoon. The average concentrations are mostly in the 80% interval of cases (between the two green curves 10–90%). The average concentrations are asymmetrically located in the different pieces of a number of case intervals during the day as well as in the different seasons. The seasonal course shows that the absolute maximum of NO_2 concentrations are highest in the autumn and the winter, which is probably due to the bigger frequency of the stable atmospheric stratification cases and the impeded vertical turbulent transport of NO_2 . The averaged ensemble annual and seasonal contributions of the different sources (Figure 3), leading to the formation of surface NO_2 in Sofia, sheds light from another perspective. The results suggest that the contribution of the different sources varies in each season but with a similar diurnal course. Everywhere during the night, the biggest natural contribution is from emissions of all SNAP categories, followed by one of the road transport (SNALL and SN7), about 30% around midnight during all seasons. The contribution of the other sources in the morning hours has a small peak of around 10%.

Figure 4 shows the annually and seasonally averaged contributions of the processes of NO_2 formation averaged for the entire domain. The main contribution for the NO_2 formation has chemical processes with a positive sign. The horizontal advection is positive

in the morning and afternoon and becomes negative at noon. The vertical advection is opposite to the horizontal one. The dry deposition and vertical diffusion have a negative contribution, although with smaller magnitudes. We can outline the positive contribution of the emissions at all hours of the day. The contribution of the other processes is almost zero.

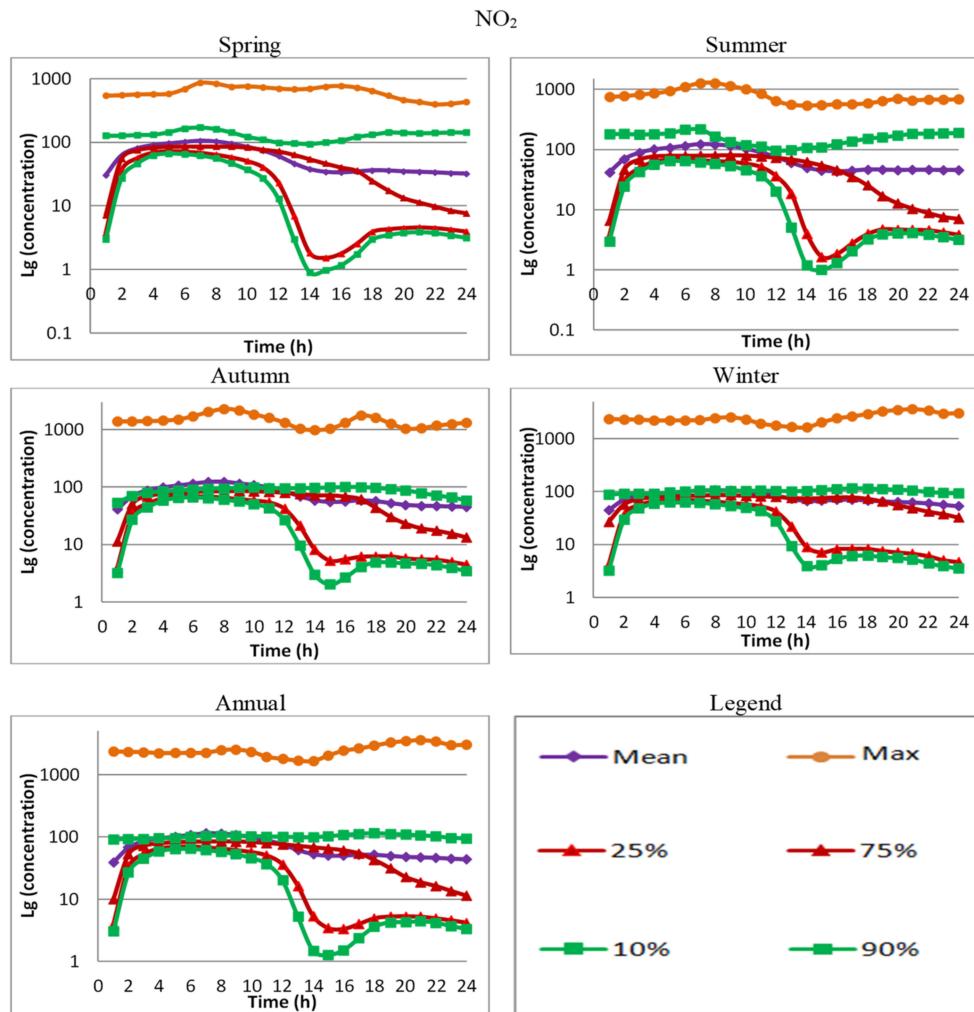


Figure 2. Spatial and diurnal variations of the annual and seasonal ensembles of surface NO_2 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) concentration behavior in logarithmic scale for Sofia for the period 2008–2014.

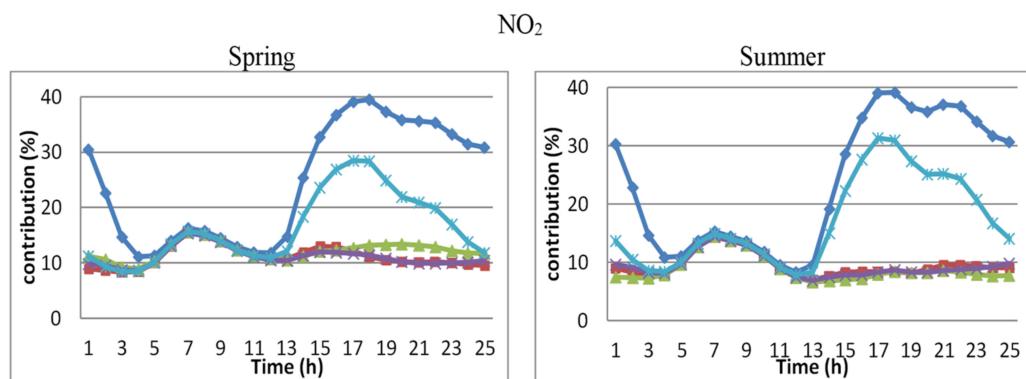


Figure 3. Cont.

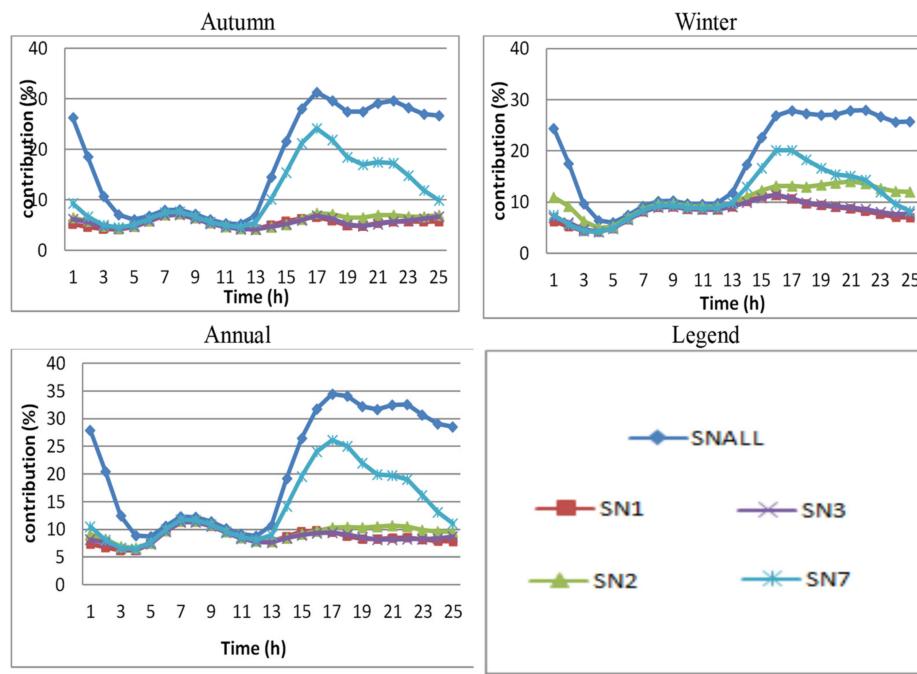


Figure 3. Annual and seasonal averaged relative contribution (%) of all emissions and emissions from different SNAP categories to the formation of NO_2 concentration in Sofia for the period 2008–2014.

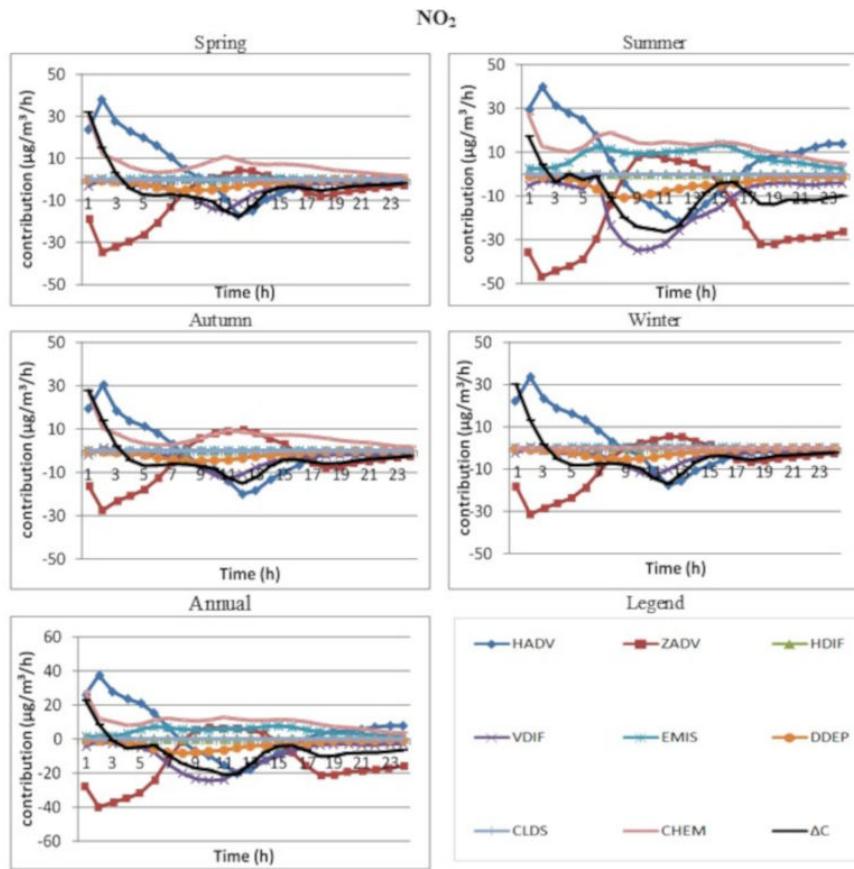


Figure 4. Annual, seasonal and diurnal course of the contribution of the different dynamic and chemical processes of the formation of NO_2 concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$) averaged for the territory of Sofia for the period 2008–2014.

The plots in Figure 5 suggest that the average FPRM concentrations have a well-expressed diurnal and seasonal course and asymmetrical distribution during the day and seasons for different intervals. The average concentrations fall into the interval containing 80% of cases during the warm months and above that for the cold ones, as during the winter, coinciding with the 90% curve. The absolute maximum and average concentrations are highest in the autumn and winter (stable stratification). There is a well-expressed maximum during the early hours for NO_2 and a minimum around noon. The possible reasons for that maximum are the stable atmosphere and intensive road traffic in the early morning. The results for the averaged by ensemble annual and seasonal contributions of any source leading to the formation of surface FPRM for Sofia city are different (Figure 6), suggesting that the contribution of the different sources varies seasonally but has an equal diurnal course. The dominating natural contribution is one of the sources of all SNAP categories (SNALL), about 40%, followed by one of the road transport (SN7), at about 30%. The contribution of the other sources is about 10% in all seasons. The diurnal distribution shows that the different SNAP categories have maximum contribution in the morning hours and afternoon, and minimum around noon and during the night, which correspond to the concentrations graphics.

The annually and seasonally averaged contributions of processes for FPRM formation averaged for the entire Sofia city domain are shown in Figure 7. The main positive contribution has vertical diffusion for the entire day and vertical advection around noon. The contribution of the vertical advection in the morning and afternoon is negative. The horizontal advection is opposite to the vertical one. The dry deposition has a negative contribution with a maximum around noon. The aerosol processes have a negative sign in all seasons except for winter. The processes are more active during the winter in comparison with other seasons. The winter is outlined with a large positive contribution of emissions and decreases to a negative contribution of vertical diffusion. The other processes have almost zero contributions.

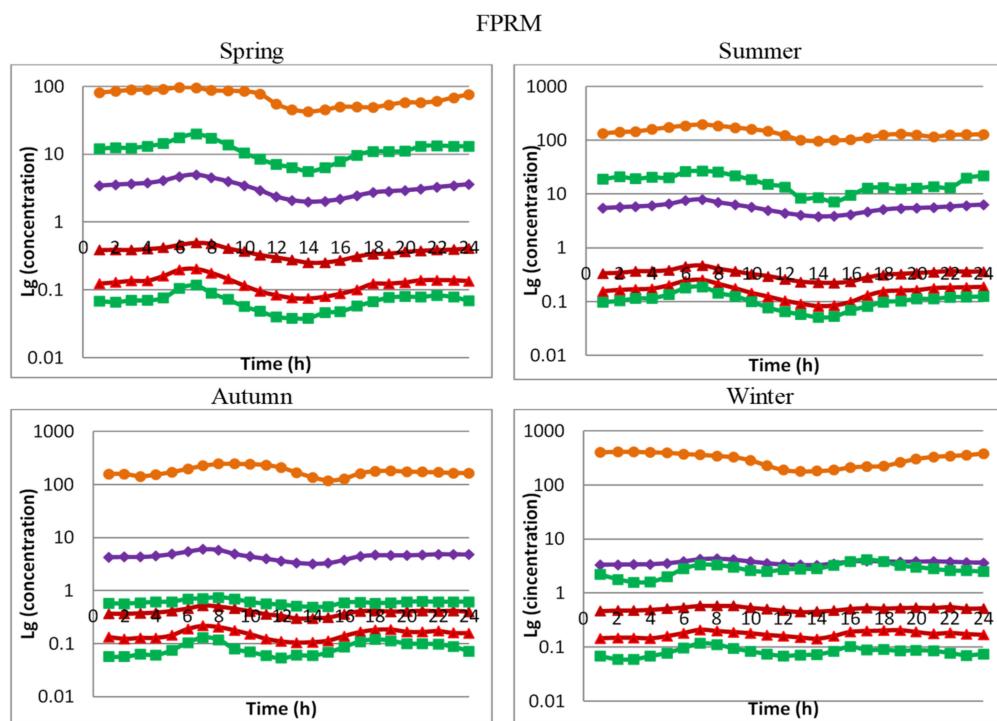


Figure 5. Cont.

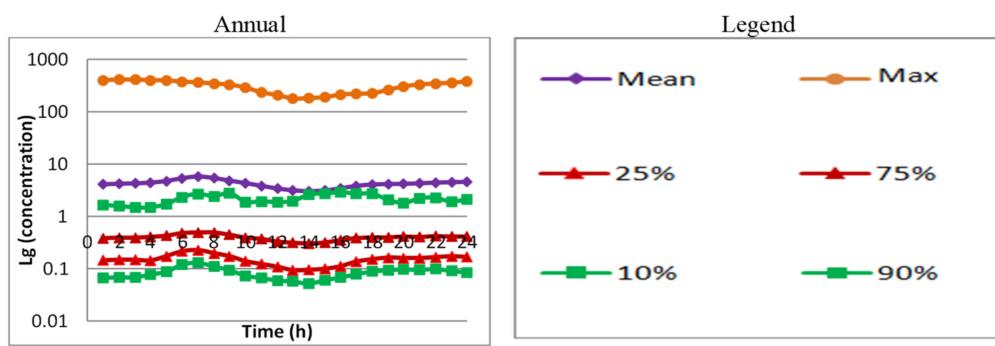


Figure 5. Spatial and diurnal variations of the annual and seasonal ensembles of surface FPRM ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) concentrations behavior in logarithmic scale for Sofia for the period 2008–2014.

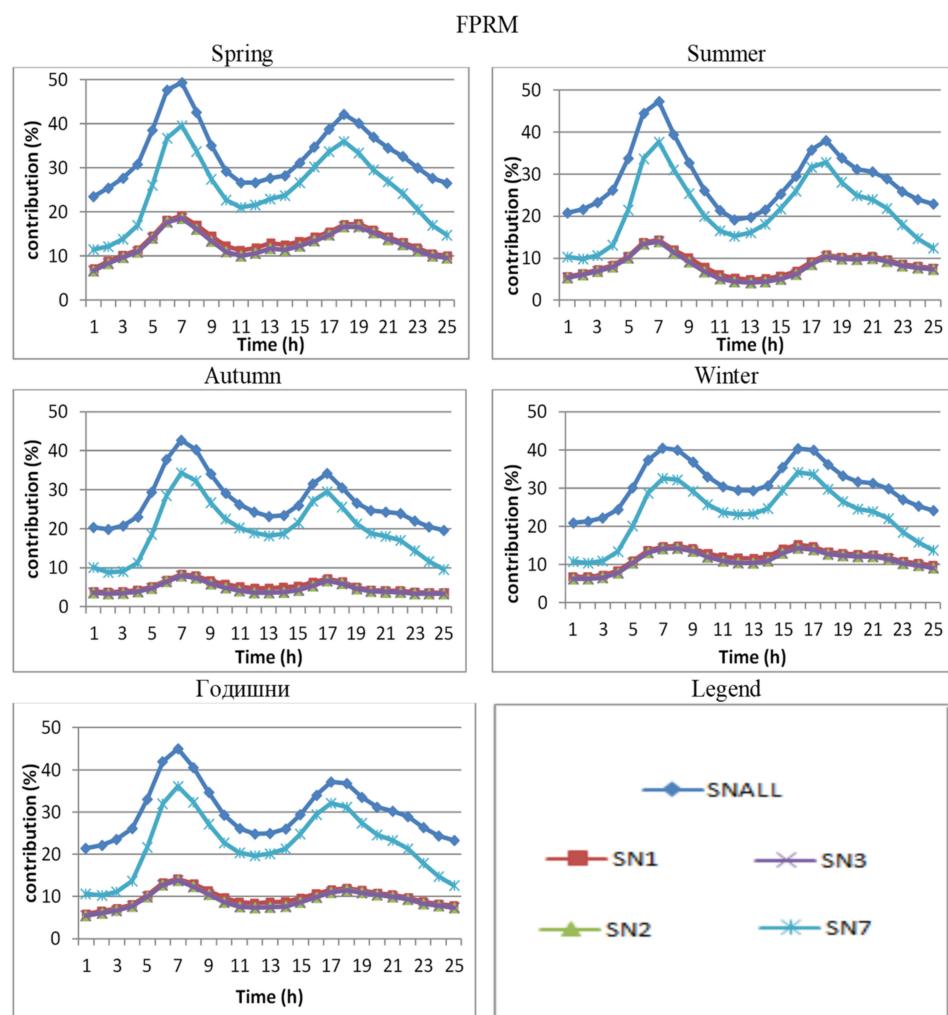


Figure 6. Annual and seasonal averaged relative contribution (%) of all emissions and the emissions from different SNAP categories of the formation of FPRM concentrations for Sofia for the period 2008–2014.

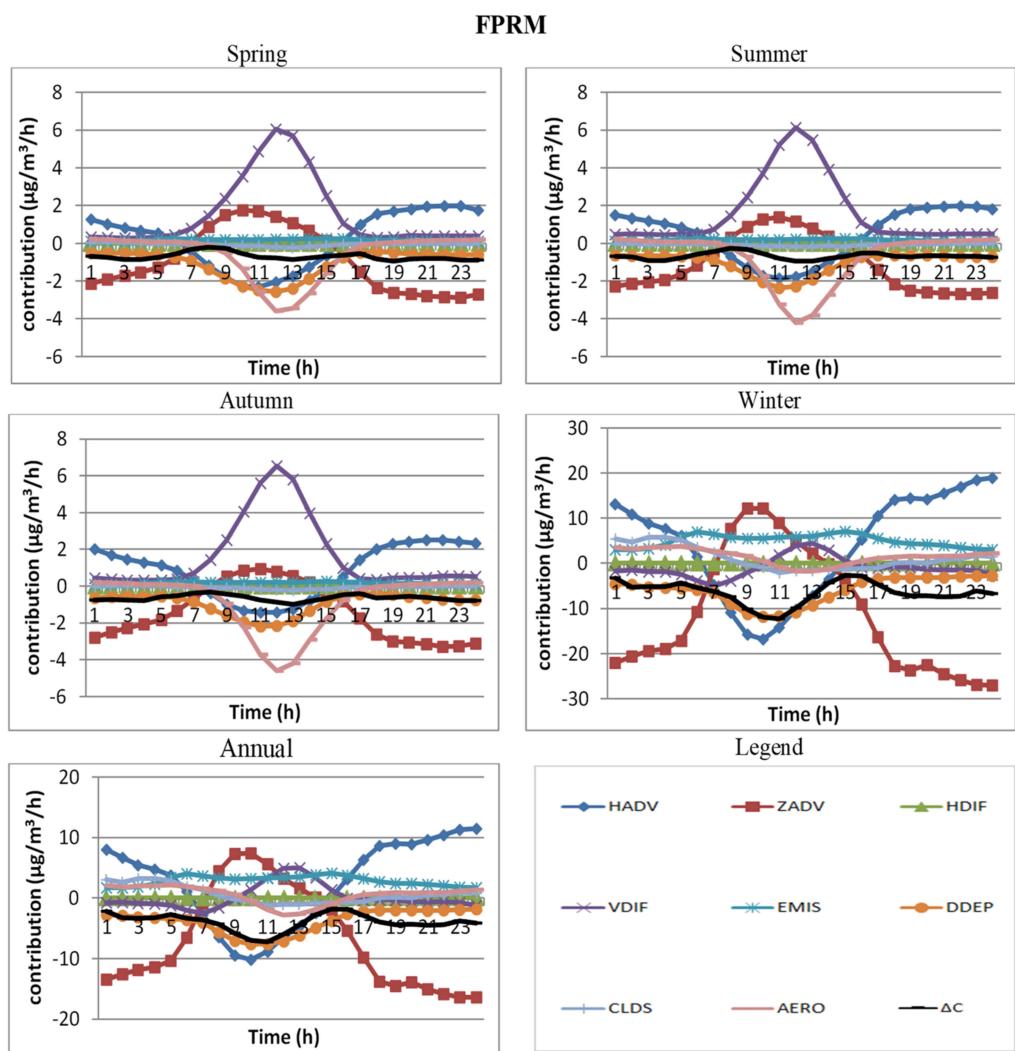


Figure 7. Annual, seasonal and diurnal course of the contribution of the different dynamic and chemical processes for the formation of FPRM concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$) averaged for the territory of Sofia for the period 2008–2014.

3.2. Characteristics of the Numerically Obtained Concentration Fields, Contribution of Different Emission Sources and Different Dynamic and Chemical Processes to the Atmospheric Composition in Orlov Most

Figure 8 shows the annually and seasonally averaged NO_2 concentrations for the Orlov most station. The results on the plots show that the average concentrations have a well-expressed diurnal course with a maximum in the early morning hours and a minimum in the afternoon. The average concentrations are mostly in the 80% interval of cases (between the two green curves, at 10–90%). The average concentrations are asymmetrically located in the different intervals of a number of cases during the day as well as the seasons. The seasonal course suggests that the absolute maximum NO_2 concentrations are highest in autumn and winter. The last is probably due to the more cases with stable atmospheric stratification and the impeded turbulent exchange of NO_2 in the vertical direction. The averaged contributions from the different sources for NO_2 formation in each season are different but with an equal diurnal course (Figure 9). The main contribution during the night is from the emissions of all SNAP sources (SNALL)—about 80%, followed by traffic (SN7)—about 50%, in spring, summer, and autumn. The second largest contribution in winter is from the industry (SN3). The contribution of all other sources in the morning hours has a peak of about 20%. The contribution of the sources from non-industrial burning (SN2) is the least.

The average annual and seasonal contributions of the processes of NO₂ for Orlov most are shown in Figure 10. The main contribution for NO₂ formation is chemical processes, which have a positive sign, as well as a high positive contribution of emissions in winter. Horizontal advection is positive during the entire day, and vertical advection is opposite. Vertical diffusion also has a negative contribution, although with smaller values and a maximum around noon. The contribution of the other processes is at almost zero magnitude.

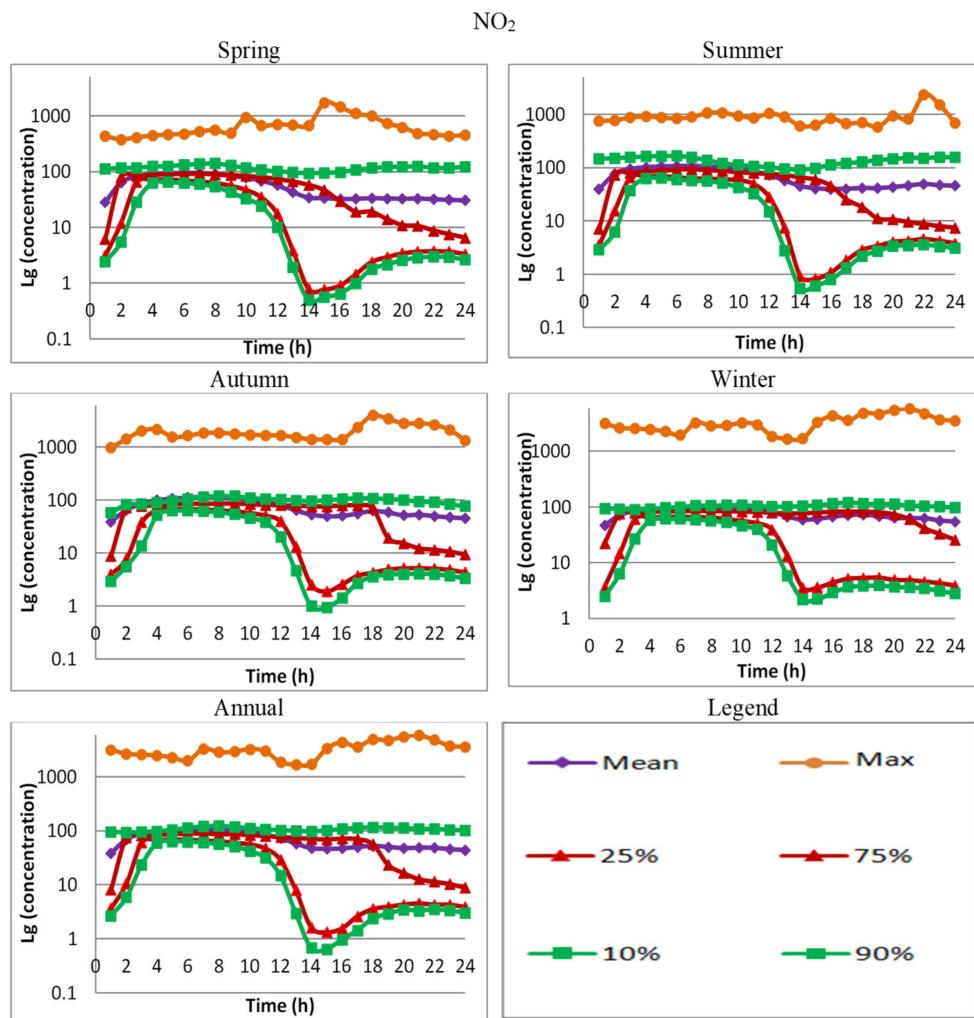


Figure 8. Spatial and diurnal variations of the annual and seasonal ensembles of surface NO₂ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) concentrations behavior in logarithmic scale for Orlov most for the period 2008–2014.

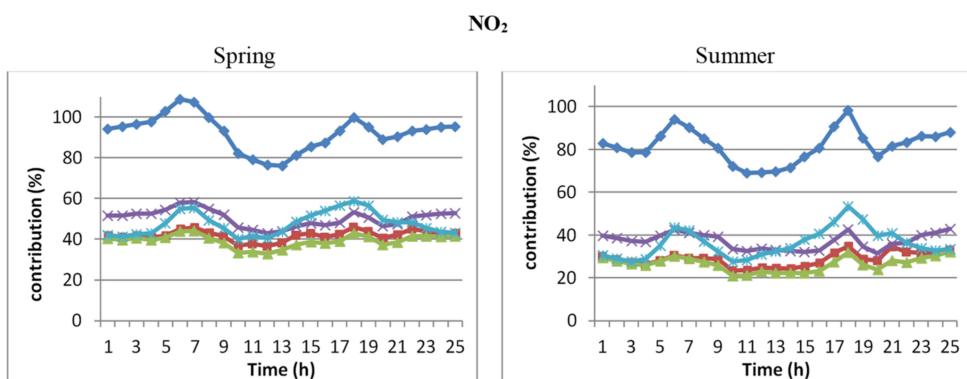


Figure 9. Cont.

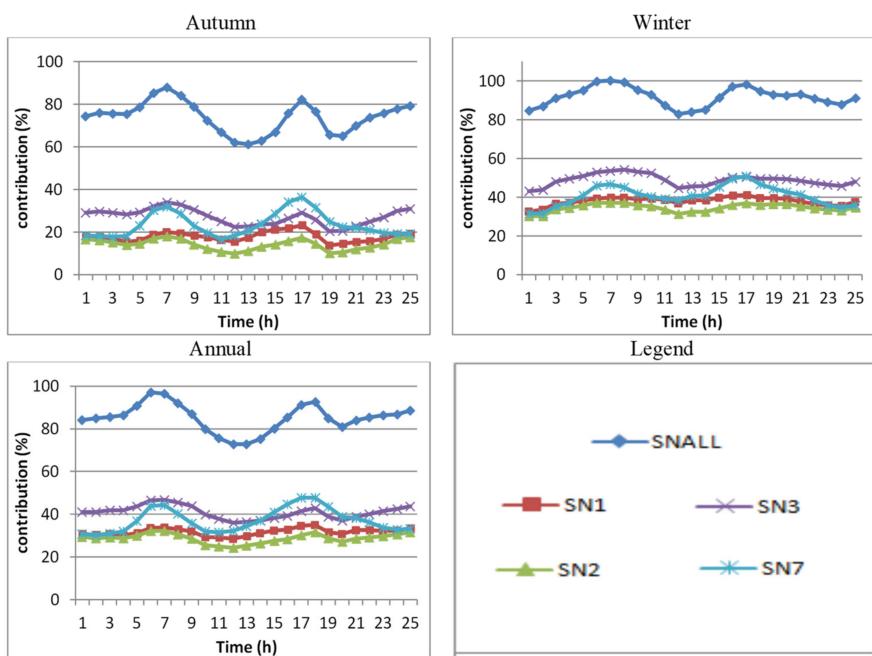


Figure 9. Annual and Seasonal averaged relative contribution (%) of all emissions and the emissions from different SNAP categories of the formation of NO₂ concentrations for Orlov most for the period 2008–2014.

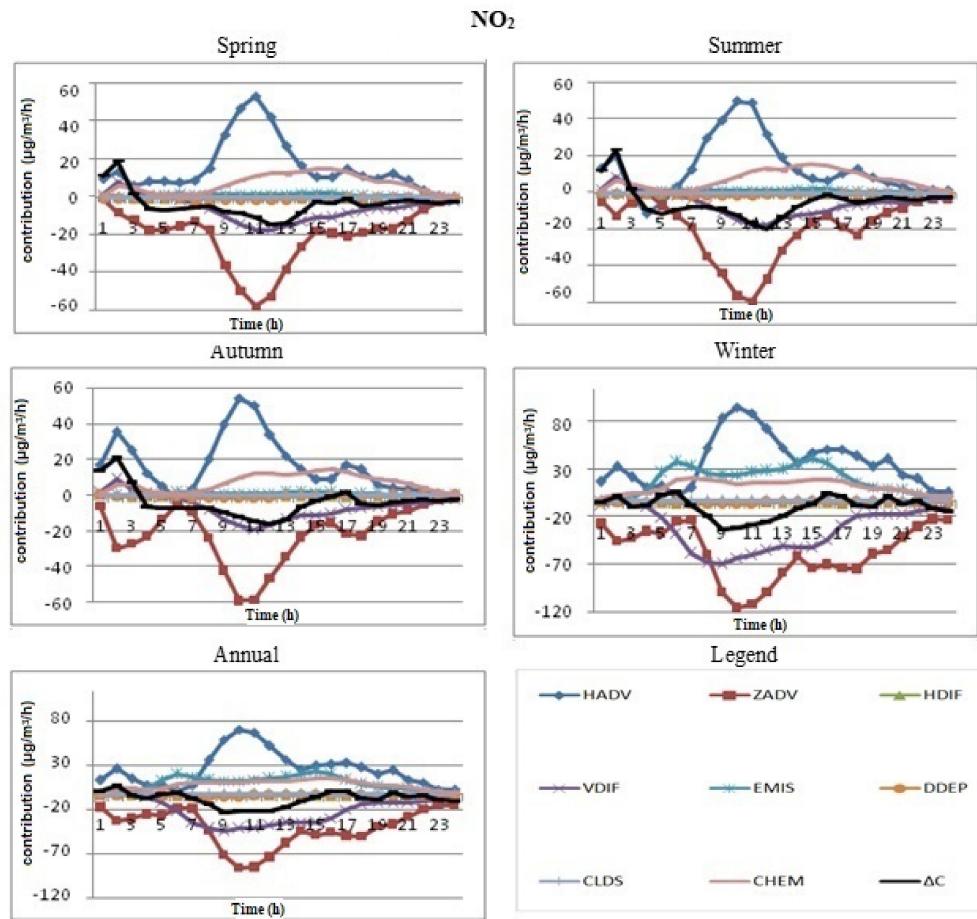


Figure 10. Annual, seasonal and diurnal course of the contribution of the different dynamic and chemical processes of the formation of NO₂ concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$) averaged for Orlov most for the period 2008–2014.

The annually and seasonally averaged concentrations of the FPRM for the Orlov most station are shown in Figure 11. The curves show that the average concentrations have well-expressed diurnal and seasonal courses and asymmetric location in different intervals of numbers of cases during the day and seasons. The average concentrations fall into the 80% cases interval during the warm months and the above interval for the cold months. The winter average concentrations coincide with the 90% curve. The absolute maximum and average concentrations are highest for autumn and winter (stable stratification). The early morning hours are characterized by well-expressed maximum and minimum around noon. Probable reasons for this maximum are the stable atmosphere and intensive traffic early morning, which probably play a role in the results for the ensemble annual and seasonal average contributions of different sources for the formation of FPRM (Figure 12). The contribution of the different types of sources varies among the seasons but with the same diurnal course. The main contribution is from sources of all SNAPs (SNALL)—about 70%—followed by the one of the road transport (SN7)—about 60%. The contribution from the other sources is about 20% in all seasons. The distribution during the course of the day has maximum contributions in the morning and afternoon and a minimum around noon and during the night.

Figure 13 shows the same characteristics as in Figure 10, but for the FPRM formation. The main positive contribution to the FPRM formation is vertical in the afternoon with vertical advection for all hours of the day. The phase of horizontal advection is opposite the vertical, which shows a negative contribution. The dry deposition is negative with a maximum around noon. The aerosol processes during all seasons except for winter have a negative contribution. The processes are more intense during the winter in comparison with the other seasons, which is outlined with a large positive contribution of emissions and which decreases to negative for vertical diffusion. The contribution of the other processes is almost zero.

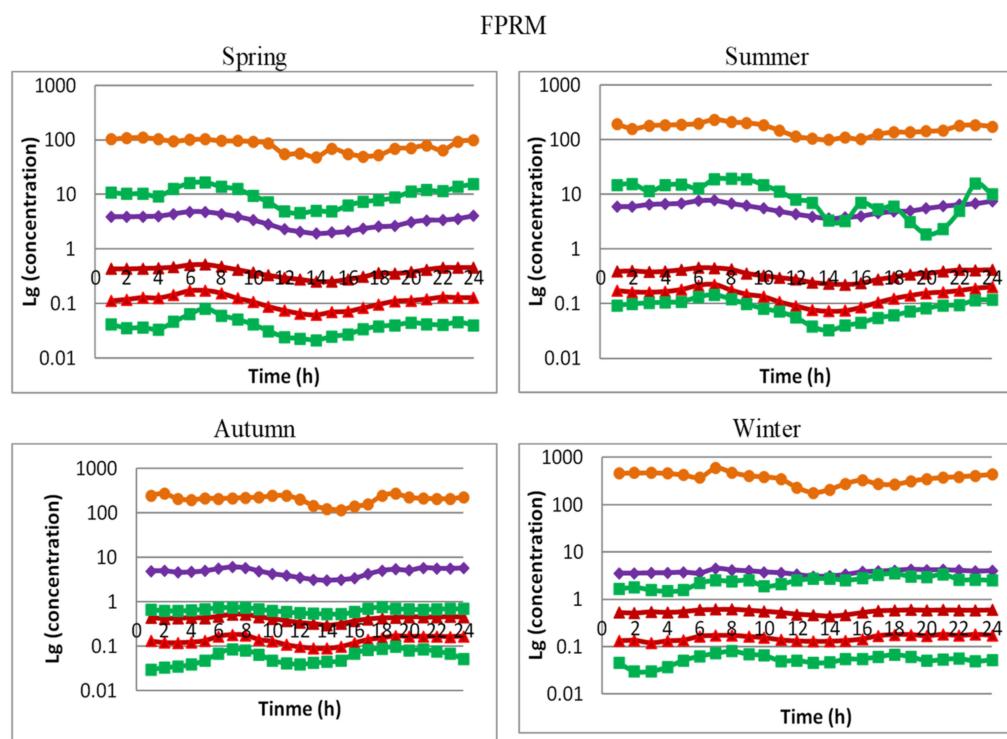


Figure 11. Cont.

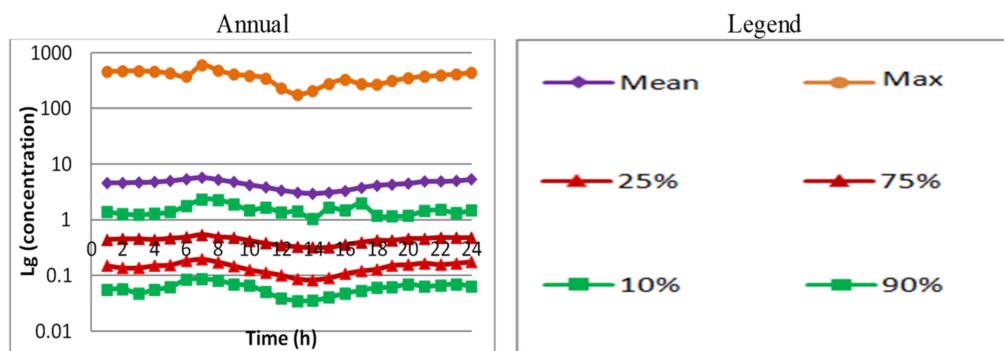


Figure 11. Spatial and diurnal variations of the annual and seasonal ensembles of surface FPRM ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) concentrations behavior in logarithmic scale for Orlov most for the period 2008–2014.

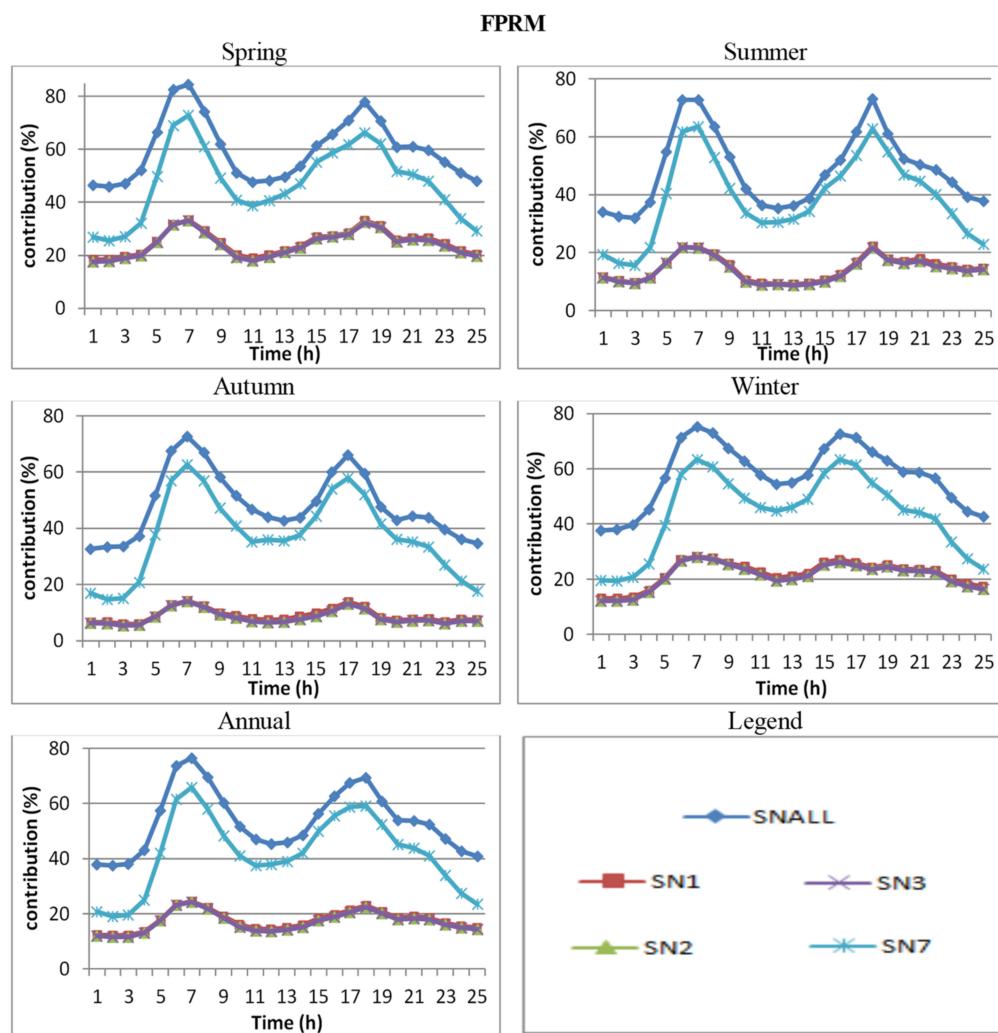


Figure 12. Annual and seasonal averaged relative contribution (%) of all emissions and the emissions from different SNAP categories of the formation of FPRM concentrations for Orlov most for the period 2008–2014.

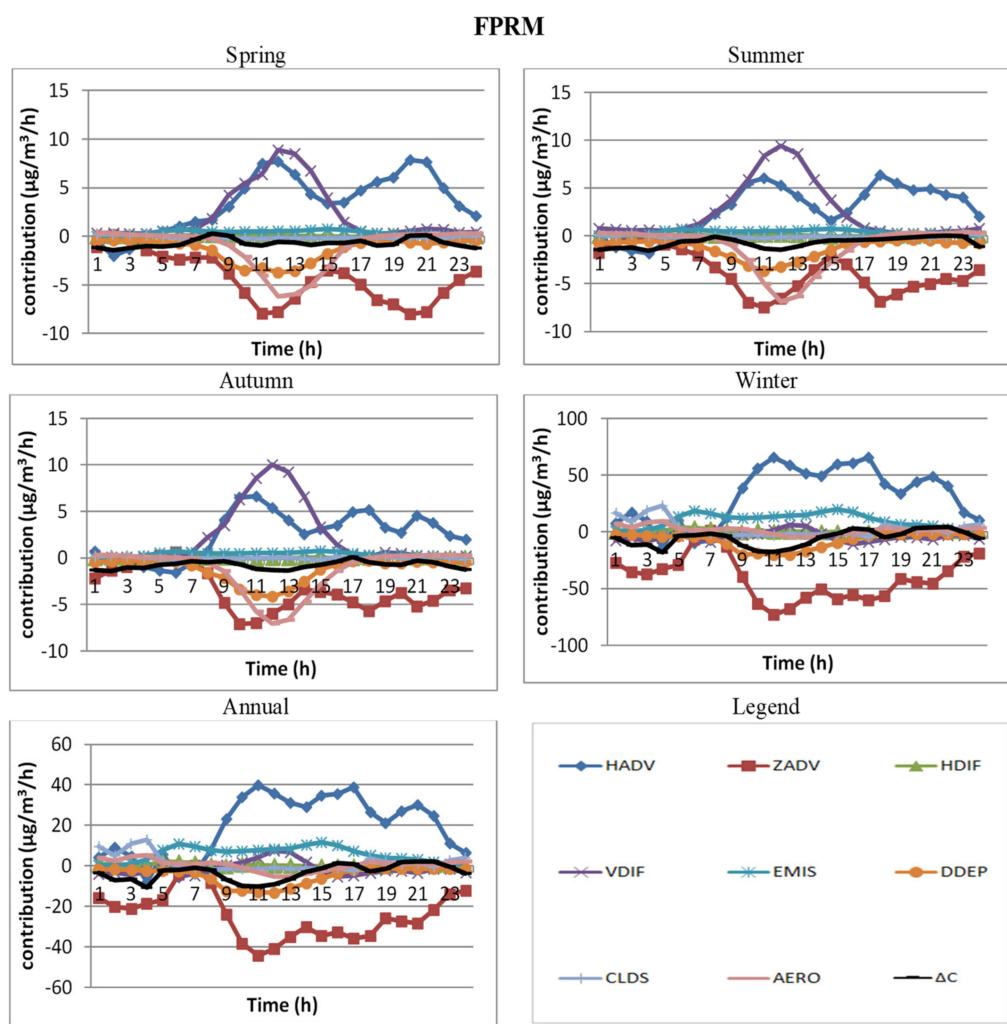


Figure 13. Annual, seasonal and diurnal course of the contribution of the different dynamic and chemical processes to the formation of FPRM concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$) averaged for Orlov most for the period 2008–2014.

3.3. Characteristics of the Numerically Obtained Concentration Fields, Contribution of Different Emission Sources and Different Dynamic and Chemical Processes to the Atmospheric Composition in Bistritsa

Figure 14 shows the annually and seasonally averaged NO_2 concentrations for the Bistritsa station. The graphics show that the average concentrations have well-expressed diurnal course with a maximum in the early morning hours and a minimum in the afternoon. The average concentration curves follow the 75% and fall into the 80% interval of cases. The locations of the average concentrations are asymmetric for different pieces of the number of cases interval during the day and for the seasons. The seasonal course suggests that the maximum nitrogen dioxide concentrations are highest in autumn and winter. The ensemble-averaged contributions for surface NO_2 formation at Bistritsa point (Figure 15) differ for each type of source and in each season, but their diurnal course is almost equal, although not for Orlov most. The contributions are positive, and the largest one in the afternoon and during the night is SNALL, followed by road transport (SN7). The contribution of the other sources in the morning hours peaks at about 20%. The contributions of the sources from energetics (SN1) and non-industrial burning (SN2) reach 15% in the afternoon during the spring and the winter.

The averaged annual and seasonal contributions of the processes of NO_2 averaged for Bistritsa are shown in Figure 16. The main contribution for NO_2 formation is chemical

processes, which have a positive sign. Horizontal advection is positive in morning hours and negative at noon, with a peak for all seasons, and vertical advection is opposite. Vertical diffusion also has a negative contribution, although with smaller values and a maximum around noon. The contribution of the other processes is of almost zero magnitude.

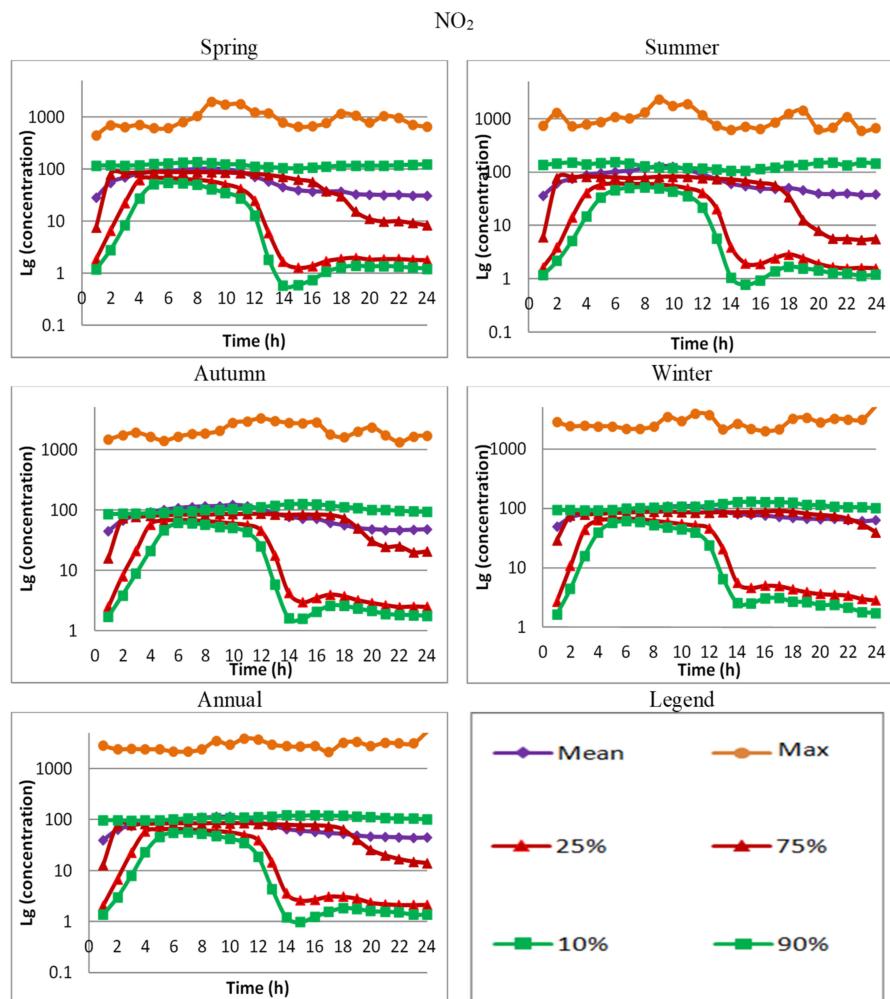


Figure 14. Spatial and diurnal variations of the annual and seasonal ensembles of surface NO_2 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) concentrations behavior in logarithmic scale for Bistritsa for the period 2008–2014.

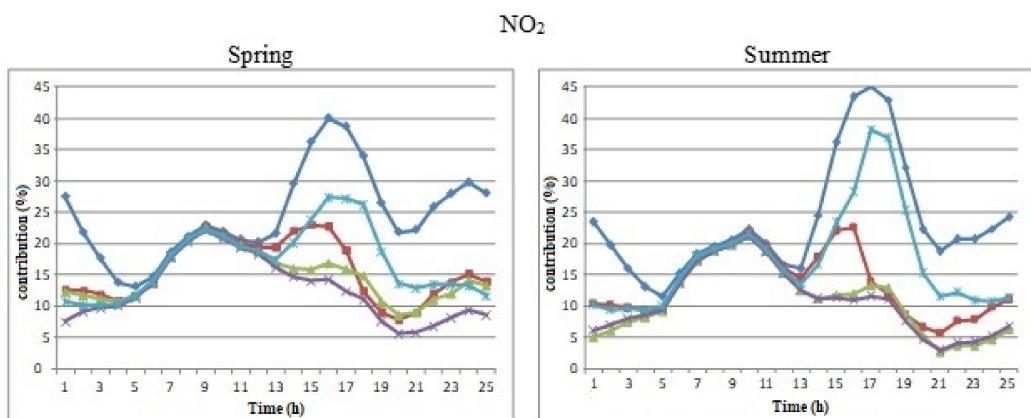


Figure 15. Cont.

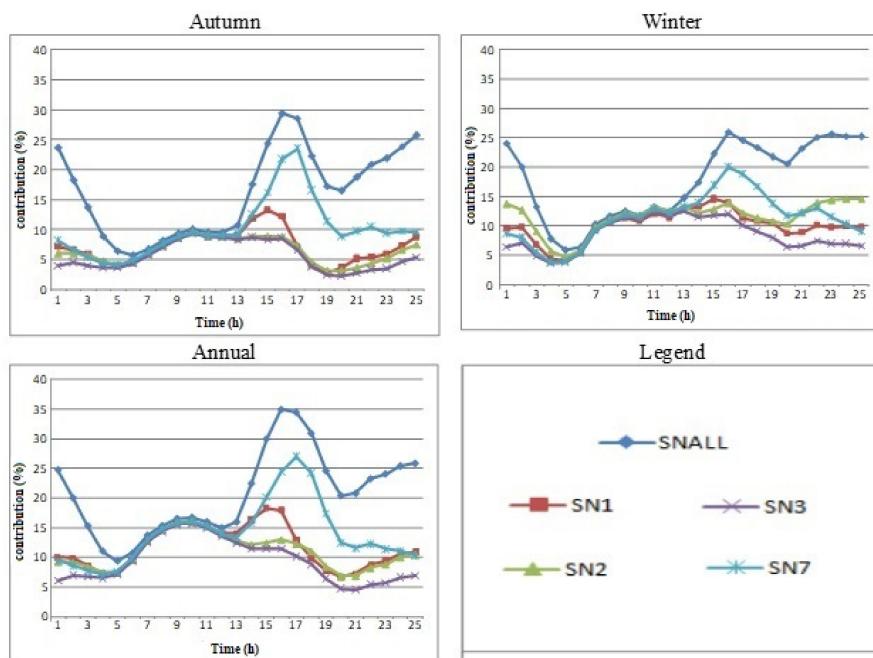


Figure 15. Annual and seasonal averaged relative contribution (%) of all the emissions and the emissions from different SNAP categories of the formation of NO_2 concentrations for Bistritsa for the period 2008–2014.

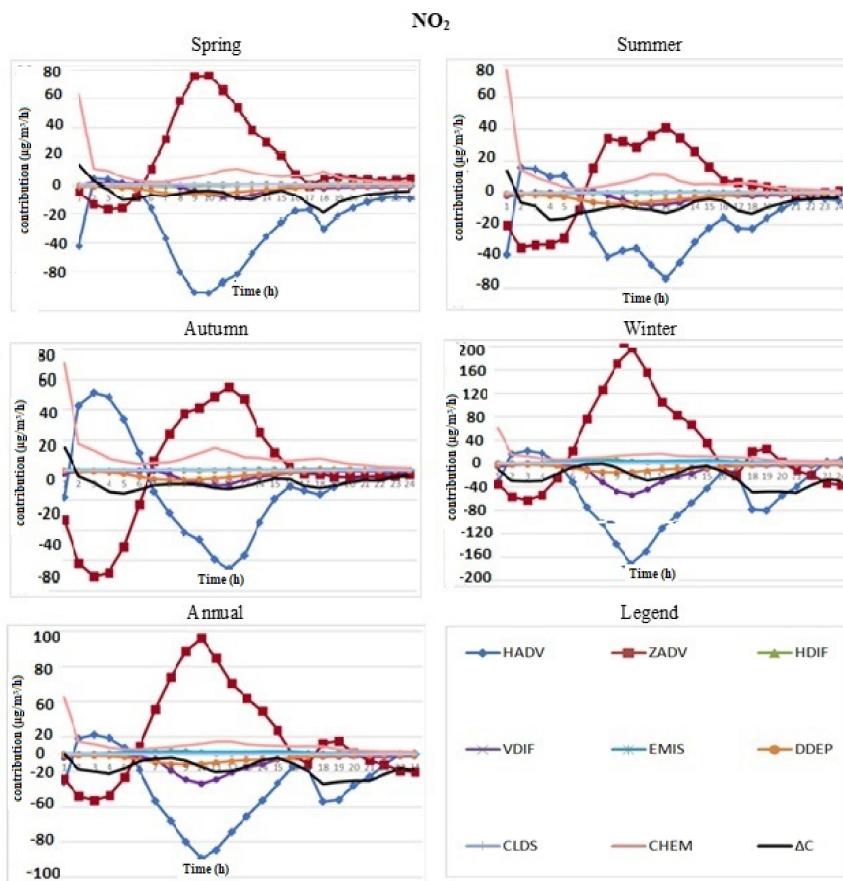


Figure 16. Annual, seasonal and diurnal course of the contribution of the different dynamic and chemical processes of the formation of NO_2 concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$) averaged for Bistritsa for the period 2008–2014.

The annually and seasonally averaged concentrations of the FPRM for the Bistritsa station are shown in Figure 17. The plots show that the average concentrations have a well-expressed diurnal and seasonal course and are asymmetrically located in different intervals of numbers of cases during the day and seasons. The average concentrations fall into the 80% cases interval during the warm months and above it for the cold months. The winter average concentrations coincide with the 90% curve. The absolute maximum and average concentrations are highest for autumn and winter. The early morning hours are characterized by a well-expressed maximum for NO_2 , with a minimum around noon, which may be due to the stable atmosphere and intensive traffic in the early morning, which probably influence the patterns of the contributions of different sources for surface FPRM formation around Bistritsa (Figure 18). The averaged contributions are different for each season. The main contribution is naturally from sources of all SNAP categories (SNALL)—about 40%—followed by road transport (SN7)—about 30%. In the afternoon, the sources from combustion in the production and transformation of energy (SN1) have a maximum of about 20%. The contribution from other sources is about 10% for all seasons. The daily distribution suggests that SNAPS have a maximum in the morning and afternoon and a minimum around noon and night.

Figure 19 shows the same characteristics as in Figure 16, but for FPRM formation. The main positive contribution to the FPRM formation is vertical diffusion for all hours of the day and vertical advection around noon. The phase of horizontal advection is opposite to the vertical one, which has a negative contribution. The dry deposition is negative with a maximum around noon. The processes are more intense during the winter in comparison with other seasons. The contribution of the other processes is almost zero.

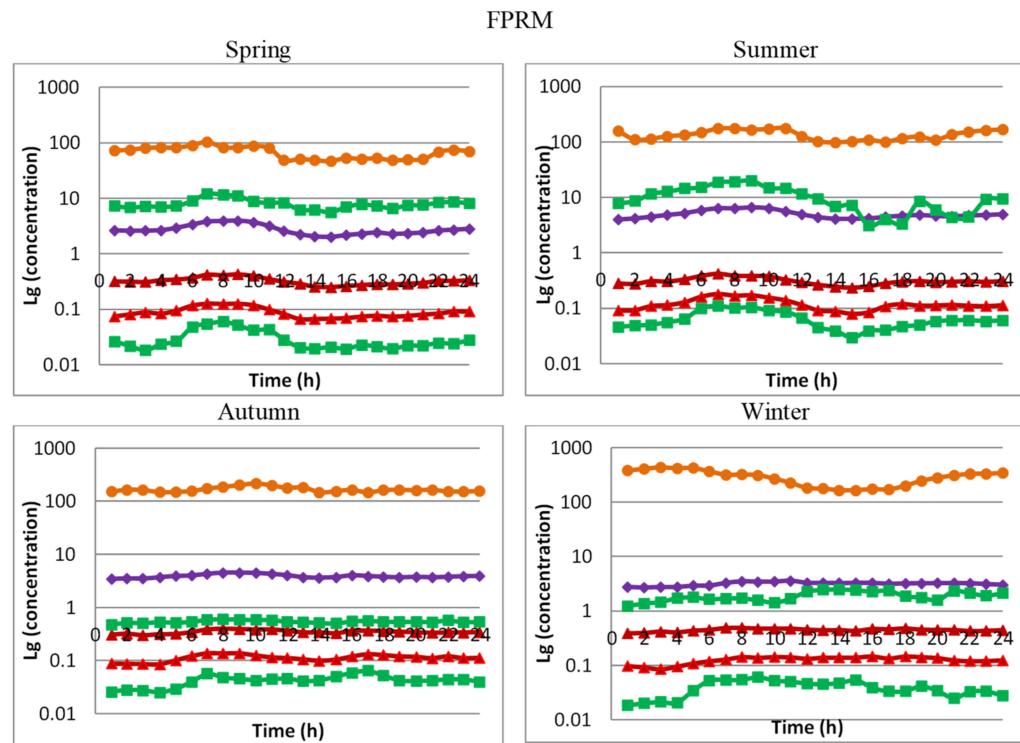


Figure 17. Cont.

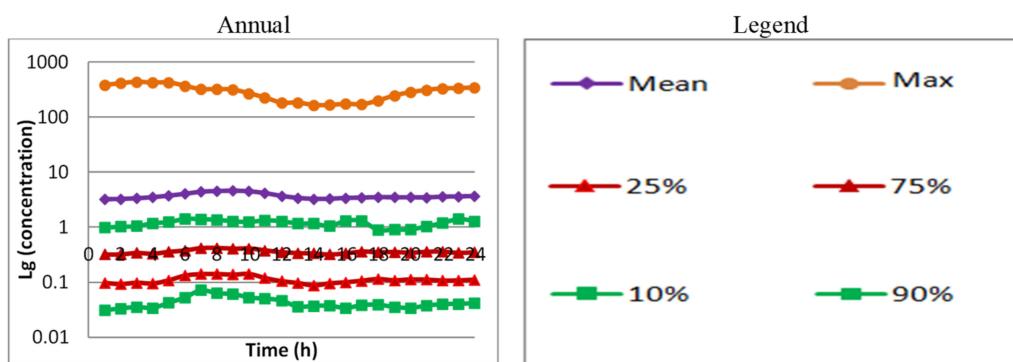


Figure 17. Spatial and diurnal variations of the annual and seasonal ensembles of surface FPRM ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) concentrations behavior in logarithmic scale for Bistritsa for the period 2008–2014.

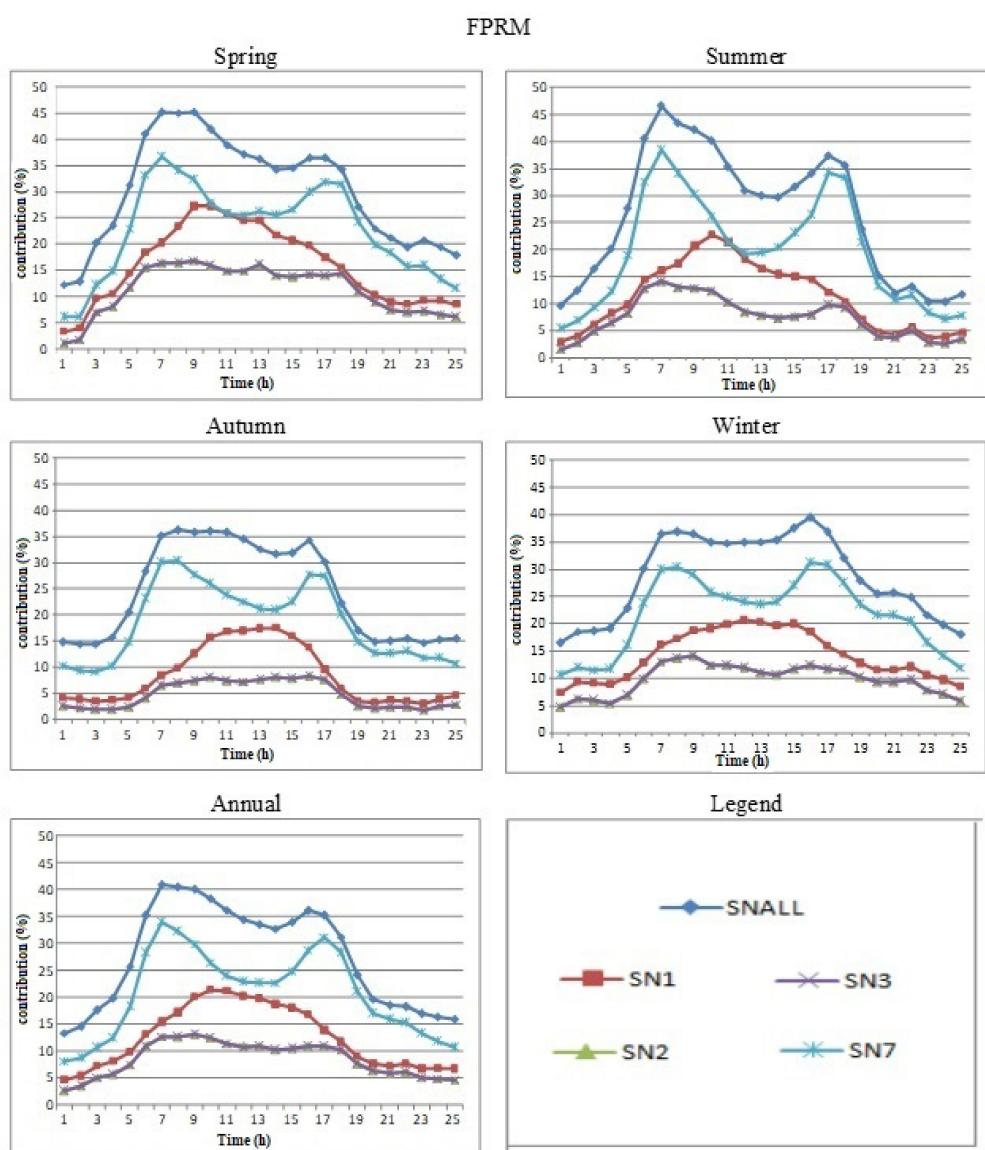


Figure 18. Annual and seasonal averaged relative contribution (%) of all the emissions and the emissions from different SNAP categories of the formation of FPRM concentrations for Bistritsa for the period 2008–2014.

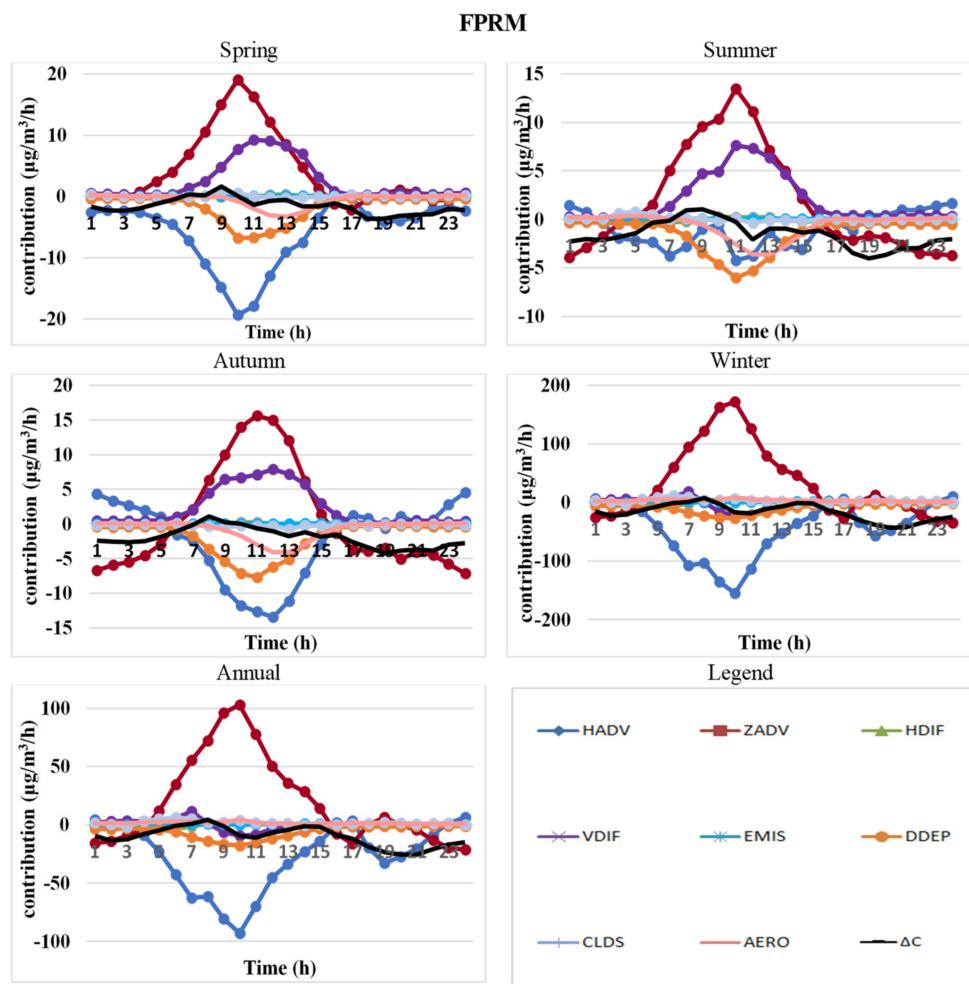


Figure 19. Annual, seasonal and diurnal course of the contribution of the different dynamic and chemical processes of the formation of FPRM concentrations ($\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$) averaged for Bistritsa for the period 2008–2014.

4. Conclusions

Statistical processing was performed, and the probability density function was calculated for each of the atmospheric compounds with the corresponding seasonal and diurnal fluctuations for each of the points of the grid or the territory of the city. Two points were selected: a mountain type “Bistritsa” and a typical city “Orlov most.” Spatial and diurnal variations of the annual ensemble of NO_2 and FPRM are considered. The minimum and maximum curves and the 25%, 75%, 10%, and 90% probability curves are shown. The curves show the imaginary concentrations for which the probability of each simulation is less than 25%, 75%, 10%, and 90%, respectively.

The concentrations of NO_2 , FPRM of Bistritsa are of the same order as Orlov Most. The NO_2 and FPRM concentrations around noon are at a local minimum and are larger during morning hours due to the combination of factors, including traffic and atmospheric stability. The NO_2 concentrations are at a minimum around noon, probably because of the more intense turbulent mixing and the slope effect. The FPRM concentrations do not have significant diurnal variations. The ensemble behavior of NO_2 and FPRM is significantly asymmetric for both selected sites.

For all emission categories, the pattern of the contribution fields is complex, which reflects the emission source configuration and the heterogeneity of topography, land use, and meteorological conditions. Plots of this kind can give a good qualitative impression of the spatial complexity of emission contributions. In order to demonstrate emission

contribution behavior in a simpler and easier way, the respective fields can be averaged over some domain, which makes it possible to follow and compare the diurnal behavior of the respective contributions of different species. The results presented in the paper are a first glance at the atmospheric composition status in urban areas; thus, few decisive conclusions can be made at this stage of the study. Different emissions, relative to contribution of the concentration of different species, can be different, varying from 80% to above 100%. The contributions of different emission categories to different species surface concentrations have different diurnal courses. For all of the pollutants, the contribution of SNALL is dominant, but this contribution of emissions is less than 100%, which means that part of the concentrations is formed from sources outside the Sofia city, due to transport into the domain. The contribution of all SN7 (road transport) to NO_2 surface concentrations is positive and reaches about 50% around the busiest traffic roads. The SN7 emissions have dominant contributions to the NO_2 and FPRM surface concentrations. The relative contribution of SNALL and SN7 to the formation of FPRM, as well as for NO_2 at the busiest traffic place, have two maximums in the diurnal course.

The estimation of the contribution of emissions from different source categories is valuable information that can be useful for the definition of measures for improving the air quality in Sofia by reducing emissions. Moreover, knowing the diurnal course of the contributions for a specific time period can suggest an optimal emission temporal regime in order to mitigate air pollution for the given episode.

The results produced by the CMAQ “integrated process rate analysis” demonstrate the complex behavior and interaction of the different processes. Further analysis of these processes, their spatial, diurnal, and seasonal variability, and interaction can be helpful for an explanation of the overall picture and origin of the pollution in the considered region. For the entire domain of Sofia, and for each of the selected items, the total concentration change (ΔC), leading to a change in a concentration, is determined mainly by a small number of dominating processes that have large values and may have opposite signs and phases. The total concentration change (ΔC) is different for each pollutant. The sign of the contributions of some of the processes is obvious, but some may have different signs, depending on the type of emissions as well as weather conditions and topography. In general, it can be concluded that the contributions of different processes have different behaviors and interact in a complex way.

The “integrated process rate analysis” is not often applied in urban air quality simulations; thus, in the case of the present study, it enriches the entire picture of the atmospheric composition climate of the city of Sofia. This ensemble treatment of the contribution of different processes, however, does not give an easy answer to how the processes interact and how exactly they form the air composition. It will probably be more fruitful to consider the process contribution for a given episode together with the specific meteorological conditions for that episode.

The obtained results and the corresponding conclusions made in this paper are in good agreement with the general idea of how urban atmospheric composition is formed; thus, they do not add general knowledge on the subject. The research and applied contribution of the paper are that it presents quantitative estimations specific to the city of Sofia. Such an extensive and comprehensive study for the city of Sofia had not been made before.

The models and the entire procedure used in the present paper can, of course, be applied to other cities. Such studies have been made for many cities. A crucial point, however, is the emission inventory, and the activities for preparing it are specific for each city, depending on the raw data available.

Author Contributions: Conceptualization, I.G. and V.I.; methodology, I.G.; software, I.G.; validation, I.G. and V.I.; formal analysis, V.I.; investigation, V.I.; resources, I.G.; data curation, V.I.; writing—original draft preparation, V.I.; writing—review and editing, V.I. and I.G.; visualization, I.G.; supervision, V.I.; project administration, I.G.; funding acquisition, V.I. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This work has been carried out in the framework of the National Science Program “Environmental Protection and Reduction of Risks of Adverse Events and Natural Disasters”, approved by the Resolution of the Council of Ministers no. 577/17.08.2018 and supported by the Ministry of Education and Science (MES) of Bulgaria (agreement no. D01-363/17.12.2020) and has been partially supported by the National Center for High-performance and Distributed Computing (NCHDC), part of National Roadmap of RIs under grant no. D01-387/18.12.2020.

Institutional Review Board Statement: Not applicable.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: The input data—large scale meteorological background and the emission inventories are described in the paper. The output from the computer simulations, which, after processing and generalization is the basis of the results, reported in the paper, is, unfortunately, still not publicly available. This is due to the requirements of the projects, which financially support the present study.

Acknowledgments: Deep gratitude to the organizations and institutes (TNO, NCEP/NCAR, ECA&D, Unidata, MPI-M and all others), which provide free of charge software and data. Without their innovative data services and tools, this study would not be possible.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

1. Syrakov, D.; Etropolska, I.; Prodanova, M.; Slavov, K.; Ganev, K.; Miloshev, N.; Ljubenov, T. Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria Region to Sofia City, American Institute of Physics. *Conf. Proc.* **2013**, *1561*, 120–132.
2. Dimitrova, R.; Velizarova, M. Assessment of the Contribution of Different Particulate Matter Sources on Pollution in Sofia City. *Atmosphere* **2021**, *12*, 423. [[CrossRef](#)]
3. Georgieva, I.; Gadzhev, G.; Ganev, K.; Miloshev, N. Analysis of The Contribution of Different Processes (Chemical and Dynamical) Which form the Atmospheric Composition in Sofia. In Proceedings of the 19th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Bruges, Belgium, 3–6 June 2019.
4. Gadzhev, G.; Georgieva, I.; Ganev, K.; Miloshev, N. Contribution of Different Emission Sources to the Atmospheric Composition Formation in City of Sofia. *Int. J. Environ. Pollut.* **2018**, *64*, 47–57. [[CrossRef](#)]
5. Gadzhev, G.; Georgieva, I.; Ganev, K.; Ivanov, V.; Miloshev, N.; Chervenkov, H.; Syrakov, D. Climate Applications in a Virtual Research Environment Platform. *Scalable Comput. Pract. Exp.* **2018**, *19*, 107–118. [[CrossRef](#)]
6. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Mukhtarov, P. HPC Simulations of the Atmospheric Composition Bulgaria’s Climate (on the Example of Coarse Particulate Matter Pollution). In *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Borovets, Bulgaria, 2–6 September 2019; Studies in Computational Intelligence*; Springer: Cham, Switzerland, 2021; pp. 221–233.
7. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Mukhtarov, P. Statistical Moments of the Vertical Distribution of Air Pollution Over Bulgaria. In *Proceedings of the 12th International Conference on Large-Scale Scientific Computing, Sozopol, Bulgaria, 10–14 June 2019*; Lirkov, I., Margenov, S., Eds.; Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics); Springer: Cham, Switzerland, 2020; pp. 213–219.
8. Gadzhev, G.; Ganev, K. Vertical Structure of Some Pollutant Over Bulgaria-Ozone and Nitrogen Dioxide. *SGEM* **2018**, *18*, 449–454. [[CrossRef](#)]
9. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Miloshev, N. Numerical Study of the Atmospheric Composition Climate of Bulgaria-Validation of the Computer Simulation Results. *Int. J. Environ. Pollut.* **2015**, *57*, 189–201. [[CrossRef](#)]
10. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Miloshev, N.; Syrakov, D.; Prodanova, M. HPC Simulations of the Fine Particulate Matter Climate of Bulgaria. In *Proceedings of the 8th International Conference on Numerical Methods and Applications, Borovets, Bulgaria, 20–24 August 2014*; Lecture Notes in Computer Science (Including Subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics); Springer: Cham, Switzerland, 2015; pp. 178–186. [[CrossRef](#)]
11. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Miloshev, N.; Syrakov, D.; Prodanova, M. Analysis of the Processes Which form the Air Pollution Pattern over Bulgaria. In *Proceedings of the 9th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, Sozopol, Bulgaria, 3–7 June 2013*; Lecture Notes in Computer Science (Including Subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics); Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2014; pp. 390–396. [[CrossRef](#)]
12. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Miloshev, N.; Syrakov, D.; Prodanova, M. Some Basic Facts about the Atmospheric Composition in Bulgaria-Grid Computing Simulations. In *Proceeding of the 9th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, Sozopol, Bulgaria, 3–7 June 2013*; Lecture Notes in Computer Science (Including Subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics); Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2014; pp. 484–490. [[CrossRef](#)]
13. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Prodanova, M.; Syrakov, D.; Atanasov, E.; Miloshev, N. Multi-Scale Atmospheric Composition Modelling for Bulgaria. In *Air Pollution Modeling and Its Application XXII; NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security*; Springer: Dordrecht, The Netherlands, 2013; Volume 137, pp. 381–385.

14. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Prodanova, M.; Syrakov, D.E.; Miloshev, N.; Georgiev, G. Some Numerically Studies of the Atmospheric Composition Climate of Bulgaria. In Proceeding of the AIP Conference Proceedings, Proceedings of the 5th International Conference for Promoting the Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, Albena, Bulgaria, 24–29 June 2013; pp. 100–111. [[CrossRef](#)]
15. Brandiyska, A.; Ganev, K.; Syrakov, D.; Prodanova, M.; Miloshev, N.; Gadzhev, G. Bulgarian Emergency Response System for Release of Hazardous Pollutants-Brief Description and Some Examples. *Int. J. Environ. Pollut.* **2012**, *50*, 3–11. [[CrossRef](#)]
16. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Syrakov, D.; Miloshev, N.; Prodanova, M. Contribution of Biogenic Emissions to the Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria. *Int. J. Environ. Pollut.* **2012**, *50*, 130–139. [[CrossRef](#)]
17. Gadzhev, G.; Syrakov, D.; Ganev, K.; Brandiyska, A.; Miloshev, N.; Georgiev, G.; Prodanova, M. Atmospheric Composition of the Balkan Region and Bulgaria. Study of the Contribution of Biogenic Emissions. In Proceeding of the AIP Conference Proceedings, Proceedings of the 3th International Conference on Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, Albena, Bulgaria, 20–25 June 2011; pp. 200–209.
18. Todorova, A.; Gadzhev, G.; Jordanov, G.; Syrakov, D.; Ganev, K.; Miloshev, N.; Prodanova, M. Numerical Study of Some High PM10 Level Episodes. *Int. J. Environ. Pollut.* **2011**, *46*, 69–82. [[CrossRef](#)]
19. Ganev, K.; Syrakov, D.; Todorova, A.; Gadzhev, G.; Miloshev, N.; Prodanova, M. Study of regional dilution and transformation processes of the air pollution from road transport. *Int. J. Environ. Pollut.* **2011**, *44*, 62–70. [[CrossRef](#)]
20. Todorova, A.D.; Ganev, K.G.; Syrakov, D.E.; Prodanova, M.; Georgiev, G.J.; Miloshev, N.G.; Gadjev, G.K. Bulgarian Emergency Response System for Release of Hazardous Pollutants-Design and First Tests. In *Air Pollution Modeling and Its Application XXI*; NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security; Steyn, D., Trini Castelli, S., Eds.; Springer: Dordrecht, The Netherlands, 2011; pp. 263–268. [[CrossRef](#)]
21. Gadzhev, G.; Jordanov, G.; Ganev, K.; Prodanova, M.; Syrakov, D.; Miloshev, N. Atmospheric Composition Studies for the Balkan Region. In *Proceedings of the 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, Borovets, Bulgaria, 20–24 August 2010*; Lecture Notes in Computer Science (Including Subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics); Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2011; pp. 150–157.
22. Gadzhev, G.; Ganev, K.; Jordanov, G.; Miloshev, N.; Todorova, A.; Syrakov, D.; Prodanova, M. Transport and Transformation of Air Pollution from Road and Ship Transport-Joint Analysis of Regional Scale Impacts and Interactions. In Proceedings of the International Conference on Transport, Atmosphere and Climate, Aachen, Germany, Maastricht, The Netherlands, 22–25 June 2009; pp. 33–37.
23. Ganev, K.; Syrakov, D.; Gadzhev, G.; Prodanova, M.; Jordanov, G.; Miloshev, N.; Todorova, A. Joint Analysis of Regional Scale Transport and Transformation of Air Pollution from Road and Ship Transport. In *Proceedings of the 7th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, Sozopol, Bulgaria, 4–8 June 2009*; Lecture Notes in Computer Science (Including Subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics); Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2010; pp. 180–187. [[CrossRef](#)]
24. Todorova, A.; Gadzhev, G.; Jordanov, G.; Syrakov, D.; Ganev, K.; Miloshev, N.; Prodanova, M. Numerical Study of Some High PM10 Levels Episodes. In *Proceedings of the 7th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, Sozopol, Bulgaria, 4–8 June 2009*; Lecture Notes in Computer Science (Including Subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics); Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2010; pp. 223–230. [[CrossRef](#)]
25. Todorova, A.; Syrakov, D.; Gadjev, G.; Georgiev, G.; Ganev, K.G.; Prodanova, M.; Miloshev, N.; Spiridonov, V.; Bogatchev, A.; Slavov, K. Grid Computing for Atmospheric Composition Studies in Bulgaria. *Earth Sci. Inform.* **2010**, *3*, 259–282. [[CrossRef](#)]
26. San, J.R.; Pérez, J.L.; Gonzalez-Barras, R.M. The Use of LES CFD Urban Models and Mesoscale Air Quality Models for Urban Air Quality Simulations. In *Proceedings of the 1st International Conference on Environmental Protection and Disaster Risks EnviroRISK 2020, Sofia, Bulgaria, 29–30 September 2020*; Dobrinkova, N., Gadzhev, G., Eds.; Studies in Systems, Decision and Control; Springer: Cham, Switzerland, 2021; pp. 185–189. [[CrossRef](#)]
27. Gryning, S.E.; Batchvarova, E. Advances in Urban Dispersion Modelling. In *Advances in Air Pollution Modeling for Environmental Security*; NATO Science Series (Series IV: Earth and Environmental, Series); Faragó, I., Georgiev, K., Havasi, Á., Eds.; Springer: Dordrecht, The Netherlands, 2005; Volume 54. [[CrossRef](#)]
28. Karagiannidis, A.; Poupkou, A.; Giannaros, T.; Giannaros, C.; Melas, D.; Argiriou, A. The Air Quality of a Mediterranean Urban Environment Area and Its Relation to Major Meteorological Parameters. *Water Air Soil Pollut.* **2015**, *226*, 2239. [[CrossRef](#)]
29. Zanis, P.; Katragkou, E.; Markakis, K.; Lysaridis, I.; Poupkou, A.; Melas, D.; Kanakidou, M.; Psiloglou, B.; Gerasopoulos, E.; Zerefos, C.; et al. Effects on Surface Atmospheric Photo-Oxidants over Greece during the Total Solar Eclipse Event of 29 March 2006. *Atmos. Chem. Phys.* **2007**, *7*, 6061–6073. [[CrossRef](#)]
30. Poupkou, A.; Symeonidis, P.; Lisaridis, I.; Melas, D.; Ziomas, I.; Yay, O.D.; Balis, D. Effects of Anthropogenic Emission Sources on Maximum Ozone Concentrations over Greece. *Atmos. Res.* **2008**, *89*, 374–381. [[CrossRef](#)]
31. Katragkou, E.; Zanis, P.; Tegoulias, I.; Melas, D.; Krüger, B.C.; Huszar, P.; Halenka, T.; Rauscher, S. Decadal Regional Air Quality Simulations over Europe in Present Climate: Near Surface Ozone Sensitivity to External Meteorological Forcing. *Atmos. Chem. Phys.* **2010**, *9*, 10675–10710. [[CrossRef](#)]
32. Kanakidou, M.; Mihalopoulos, N.; Kindap, T.; Im, U.; Vrekoussis, M.; Gerasopoulos, E.; Dermitzaki, E.; Unal, A.; Kocak, M.; Markakis, K.; et al. Megacities as Hot Spots of Air Pollution in the East Mediterranean. *Atmos. Environ.* **2010**, *45*, 1223–1235. [[CrossRef](#)]

33. Im, U.; Poupkou, A.; Incecik, S.; Markakis, K.; Kindap, T.; Unal, A.; Melas, D.; Yenigun, O.; Topcu, S.; Odman, M.T.; et al. The Impact of Anthropogenic and Biogenic Emissions on Surface Ozone Concentrations in Istanbul. *Sci. Total Environ.* **2011**, *409*, 1255–1265. [[CrossRef](#)] [[PubMed](#)]
34. Juda-Rezler, K.; Reizer, M.; Huszar, P.; Krüger, B.C.; Zanis, P.; Syrakov, D.; Katragkou, E.; Trapp, W.; Melas, D.; Chervenkov, H.; et al. Modelling the effects of climate change on air quality over Central and Eastern Europe: Concept evaluation and projections. *Clim. Res.* **2012**, *53*, 179–203. [[CrossRef](#)]
35. Marécal, V.; Peuch, V.-H.; Andersson, C.; Andersson, S.; Arteta, J.; Beekmann, M.; Benedictow, A.; Bergström, R.; Bessagnet, B.; Cansado, A.; et al. A Regional Air Quality Forecasting System over Europe: The MACC-II Daily Ensemble Production. *Geosci. Model Dev.* **2015**, *8*, 2777–2813. [[CrossRef](#)]
36. Shamarock, W.C.; Klemp, J.B.; Dudhia, J.; Gill, D.O.; Barker, D.M.; Duda, M.G.; Huang, X.-y.; Wang, W.; Powers, J.G. A Description of the Advanced Research WRF Version 3. 2007. Available online: <https://opensky.ucar.edu/islandora/object/technotes%3A500/datasream/PDF/view> (accessed on 20 October 2021).
37. Byun, D.; Young, J.; Gipson, G.; Godowitch, J.; Binkowski, F.S.; Roselle, S.; Benjey, B.; Pleim, J.; Ching, J.; Novak, J.; et al. Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. In *Proceedings of the 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA*; Phoenix, AZ, USA, 11–16 January 1998, pp. 264–268. Available online: <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html> (accessed on 20 October 2021).
38. Byun, D.; Ching, J. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. Available online: https://cfpub.epa.gov/si/si_public_record_report.cfm?dirEntryId=63400&Lab=NERL (accessed on 20 October 2021).
39. SMOKE v3.5.1 User's Manual; The University of North Carolina at Chapel Hill: Chapel Hill, NC, USA, 2013. Available online: https://www.cmasccenter.org/smoke/documentation/3.5.1/manual_smokev351.pdf (accessed on 20 October 2021).
40. Vestreng, V. *Emission Data Reported to UNECE/EMEP: Evaluation of the Spatial Distribution of Emissions*. Meteorological Synthesizing Centre-West; The Norwegian Meteorological Institute: Oslo, Norway, 2001; Research Note 56, EMEP/MSC-W Note 1.
41. Visschedijk, A.J.H.; Zandveld, P.Y.J.; Denier van der Gon, H.A.C. A High Resolution Gridded European Emission Database for the EU Integrate Project GEMS. Available online: <http://lap.physics.auth.gr/gems/docu/TNO%20Short%20Emissions%20Report.pdf> (accessed on 20 October 2020).
42. Denier van der Gon, H.; Visschedijk, A.; van de Brugh, H.; Droge, R. *A High Resolution European Emission Data Base for the Year 2005*; TNO-Report TNO-034-UT-2010-01895 RPT-ML; Environment, Health and Safety: Utrecht, The Netherlands, 2010. Available online: https://webdosya.csb.gov.tr/db/necen/editordosya/file/NEC/MACC_Training/TNO_PAREST.pdf (accessed on 20 October 2020).

**THE ASSESSMENT OF AIR QUALITY STATUS IN SOFIA CITY -
NUMERICAL SIMULATIONS OF THE DOMINANT POLLUTANTS THAT
DETERMINES THE AIR QUALITY INDEX**

Assist. Prof. Dr. Ivelina Georgieva

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography, Bulgarian Academy of Sciences,
Bulgaria

ABSTRACT

Based on 3D modelling tools, an extensive database was created and used for different studies of atmospheric composition. The simulations were based on the US EPA Model-3 system. The models in the system were adapted and validated for Bulgaria. This gave the opportunity to conduct extensive studies on a fully competitive modern level of the climate of atmospheric composition in the country. On this basis, a statistically significant ensemble of Air Quality indexes (AQI) was calculated, and their typical recurrence, space, and temporal variability for the territory of the country was constructed. In Bulgaria, the AQI is operationally calculated in the frame of the Bulgarian Chemical Weather Forecast System. The Bulgarian Chemical Weather Forecast and Information System (BgCWFIS) runs on five nested domains with an increasing spatial resolution to 1 km for the territory of Sofia city. The AQ impact on human health is evaluated in terms of AQI, which gives an integrated assessment of the impact of pollutants. All the AQI evaluations are based on air pollutants concentrations obtained from the numerical modelling. The operational results of BgCWFIS created an ensemble sufficiently exhaustive and representative to allow making reliable conclusions for the atmospheric composition status and behavior. The generalization and analysis of these results, in particular, AQI, is the objective of the present work.

The presented results allow us to estimate the highest recurrence of the indices for the whole ensemble annually and seasonally and analyze the possible reason for high values in different bands and AQI statuses in the city.

Keywords: Air Quality Indexes, 3D modelling, numerical modelling, dominant pollutant

INTRODUCTION

A system for Chemical Weather Forecast operates in many European countries, together with the numerical weather forecast. In Bulgaria the BgCWFIS runs and also calculates the AQI - an integrated assessment of the impact of pollutants, directly measuring the effects of AQ on human health. The operational results of BgCWFIS created an ensemble sufficiently exhaustive and representative to allow making reliable conclusions for the atmospheric composition status and behaviour. A generalization and analysis of these results, in particular, AQI, is the objective of the present work. The AQI evaluations are based on extensive computer simulations of the AQ in Sofia carried out with good resolution using up-to-date modelling tools and detailed and reliable input data.

13th International Conference on
"Large-Scale Scientific Computations"
June 7-11, 2021
Sozopol, Bulgaria

CERTIFICATE

Herewith we certify that the following paper is accepted for publication in the conference proceedings which will be published as a special volume of Springer Lecture Notes in Computer Science:

I. Georgieva, G. Gadzhev, K. Ganev, Study the Recurrence of the Dominant Pollutants in the Formation of AQI Status over the City of Sofia for the Period 2013-2020

Date: 14.06.2021

Volume editor:


/S. Margenov/

Study the Recurrence of the Dominant Pollutants in the Formation of AQI Status Over the City of Sofia for the Period 2013-2020

Ivelina Georgieva, Georgi Gadzhev and Kostadin Ganev

National Institute of Geophysics, Geodesy and Geography – Bulgarian Academy of Sciences, , Acad. G. Bonchev str., bl. 3 1113 Sofia, Bulgaria

iivanova@geophys.bas.bg

Abstract. Recently it became possible to acquire and adapt the most up-to-date models of local atmospheric dynamics - WRF, transport and transformation of air pollutants - CMAQ, and the emission model SMOKE. This gave the opportunity to conduct extensive studies of the atmospheric composition climate of the country on fully competitive modern level. Ensemble, sufficiently exhaustive and representative to make reliable conclusions for atmospheric composition typical and extreme situations with their specific space and temporal variability was created by using of computer simulations. On this basis statistically significant ensemble of corresponding Air Quality indices (AQI) was calculated, and their climate typical repeatability, space and temporal variability for the territory of the country was constructed. The Air Quality (AQ) impact on human health and quality of life is evaluated in the terms of AQI, which give an integrated assessment of the impact of pollutants and directly measuring the effects of AQ on human health. All the AQI evaluations are on the basis of air pollutant concentrations obtained from the numerical modelling and make it possible to review the AQI status spatial/temporal distribution and behavior.
The presented results, allow to follow highest recurrence of the indices for the whole period and seasonally, and to analyze the possible reason for high values in the Moderate, High and Very High bands.

Keywords: air pollution modeling · Air Quality indexes · AQ impact · atmospheric composition · AQI Status

Introduction

According to the World Health Organization, air pollution severely affects the health of European citizens. There is increasing evidence of adverse effects of air pollution on the respiratory and the cardiovascular system as a result of both acute and chronic exposure [17]. There is considerable concern about impaired and detrimental air quality conditions over many areas in Europe, especially in urbanized areas, despite 30 years of legislation and emission reductions.

СЕЗОННА И ГОДИШНА ПОВТОРЯЕМОСТ НА ИНДЕКСИТЕ ЗА КАЧЕСТВОТО НА АТМОСФЕРНИЯ ВЪЗДУХ ЗА РАЙОНА НА ГРАД СОФИЯ

И. Георгиева

¹ Национален Институт по Геофизика, Геодезия и География, Българска Академия на Науките, ул. Акад. Георги Бончев, блок 3, София, България, e-mail: iivanova@geophys.bas.bg

DOI: 10.34975/bgj-2021.44.2

Абстракт. Със средствата за 3D моделиране е създадена обширна база данни, която се използва в България за различни изследвания за състава на атмосферата. Всички тези изследвания са проведени с достатъчно голяма разрешаваща способност и с помощта на най-съвременните инструменти за моделирани, а именно модели от световно използваната система US EPA Model-3. Благодарение на това, са проведени задълбочени проучвания на климата на атмосферния състав в страната със специален фокус върху градска среда. Изчислен е статистически значим ансамбъл за индекс на замърсяване (ИЗ), като е определена и неговата пространствена и времева променливост както и типичната му повтаряемост за територията на град София. ИЗ оценява въздействието на качеството на атмосферния въздух върху човешкото здраве и дава директна оценка на ефектите от атмосферните замърсители. Всички оценки на ИЗ са получени на база концентрации на замърсители в атмосферата, получени чрез числени симулации.

Ключови думи: замърсяване на атмосферния въздух, индекс на замърсяване, доминантни замърсители.

Въведение

В настоящата работа са проведени детайлни изследвания относно ИЗ и влиянието му върху човешкото здраве. Изследванията са надеждни и изчерпателни, поради използването на статистически значими ансамбли от компютърно симулирани данни, които отразяват многообразието на метеорологични условия с тяхната типична повтаряемост, съчетани с компютърно симулираните данни за концентрации на замърсители, позволяват надеждни изводи относно техните характерни

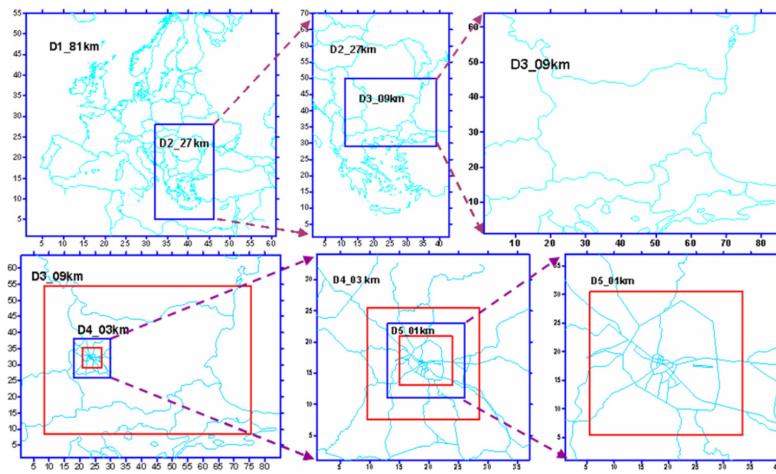
особености и поведение и влиянието им върху ИЗ. Изследванията са и детайлни, понеже са извършени с достатъчно висока пространствено/временна разрешаваща способност на полетата, която дава възможност да бъде отразен мултимашабния характер на процесите. Извършени са изследвания за територията на град София, които отразяват нейната специфичната климатология и екология. Ансамблите, обхващащи симулации за период от 13 години (от 2008 до 2020 година), се смятат за статистически представителни и отразяват основните черти на локалния климат, на атмосферната динамика и на качеството на въздуха.

Изследванията за ИЗ са в рамките на Българската Система за Прогноза на Химичното Време (БгСПХВ) (Syrakov et al. 2013a, 2013b, 2014a). БгСПХВ изчислява и ИЗ, който дава интегрирана оценка на въздействието на замърсителите, директно измерващ ефектите върху човешкото здраве. Резултатите от дейността на БгСПХВ позволяват да се направят надеждни заключения за състоянието и поведението на атмосферния състав. Обобщаването и анализът на тези резултати, по-специално за ИЗ, неговото пространствено времево разпределение, както и определяне на доминантни замърсители е целта на настоящата работа.

Методология

В България заедно с числената прогноза на времето, работи системата за прогноза на химичното време – БгСПХВ. Системата е автоматична и се базира на световно известните числени модели WRF (мезометеорологичен прогностичен модел) <http://www.wrf-model.org/>, Skamarock et al. (2007), Dudhia, J. (1993), CMAQ (дисперсионен модел с отчитане на атмосферната химия) Byun and Ching (1999), Byun et al. (1998) и SMOKE <http://www.smoke-model.org/>, CEP (2003). Моделите на които е базирана системата разполагат с различна физическа основа, и са приспособени към многообразието на мащабите на пренос - от глобален до локален мащаб в много различни разработени за състава на атмосферата в България (Gadzhev et al. 2013a, 2014a, 2014b, 2015a, 2015b, 2020, 2021a, 2021b), (Gadzhev G. and K. Ganev., 2018a, 2018b, 2019), (Gadzhev G. and V. Ivanov 2020, 2021). Използван е телескопният подход (нестинг) с увеличение на разделителната способност на симулациите от 81 км за Европа, до 1 км за територията на град София, Фигура 1. Емисионните данни за големите области са подгответи от Холандската организация за приложни научни изследвания (TNO) за 2010 г. (Denier van der Gon et al., 2010), а за България и по-малките области се използва Националната инвентаризация на емисиите, предоставена от Българската изпълнителна агенция по околната среда, подгответа от MOCB.

На база получените концентрации от компютърното моделиране БгСПХВ изчислява ИЗ, по подобие на Британският дневен индекс за качество на въздуха (Leeuw, F. de, Mol, W., 2005), използван и в България (Syrakov et al. 2012, 2013a, 2014a, 2014b, 2015), (Gadzhev, G., 2018, 2020, 2021), (Georgieva et al. 2014, 2015), (Georgieva, I. and Ivanov, V., 2017, 2018).



Фиг. 1. Телескопизация на метеорологична (WRF) и химична (CMAQ) прогноза от област Европа (81 км) до София град (1 км).

Основните замърсители, върху чиято база се изчислява индекса са 5: Озон (O_3), Азотен диоксид (NO_2), Серен диоксид (SO_2), Въглероден оксид (CO), и Прахови частици (PM_{10} – Прахови частици, които са финни с диаметър между 2.5 and 10 микрометра). Граничните стойности между ИЗ са определени за всеки замърсител поотделно, като за всеки конкретен случай концентрацията на дадения замърсител попада в една от категориите („Ниско“, „Средно“, „Високо“ и „Много Високо“) и се определя ИЗ за всеки замърсител Фигура 2. Обобщеният ИЗ е за всеки замърсител, при който в дадения случай индекса попада в най високата категория. Замърсителят, който определя общия ИЗ за дадения конкретен случай, се дефинира като „доминантен замърсител“.

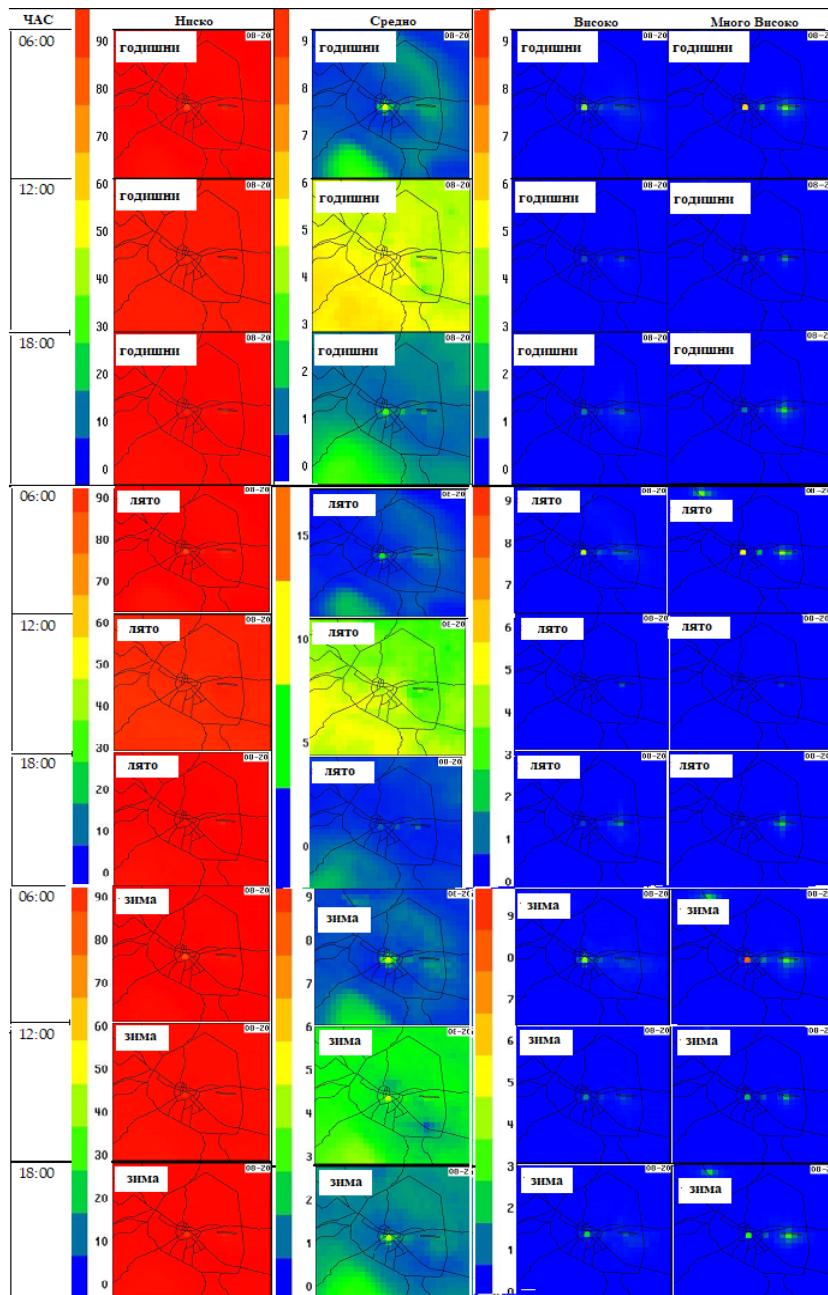
Категория		O_3	NO_2	SO_2	CO	PM_{10}
индекс		$\mu g/m^3$				
Ниско	1	0-32	0-95	0-88	0-3.8	0-21
	2	33-66	96-190	89-176	3.9-7.6	22-42
	3	67-99	191-286	177-265	7.7-11.5	43-64
Средно	4	100-126	287-381	266-354	11.6-13.4	65-74
	5	127-152	382-477	355-442	13.5-15.4	75-86
	6	153-179	478-572	443-531	15.5-17.3	87-96
Високо	7	180-239	573-635	532-708	17.4-19.2	97-107
	8	240-299	636-700	709-886	19.3-21.2	108-118
	9	300-359	701-763	887-1063	21.3-23.1	119-129
Много Високо	10	> 360	> 764	> 1064	> 23.2	> 130

Фиг. 2. Граничните стойности между индекса за всеки замърсител.

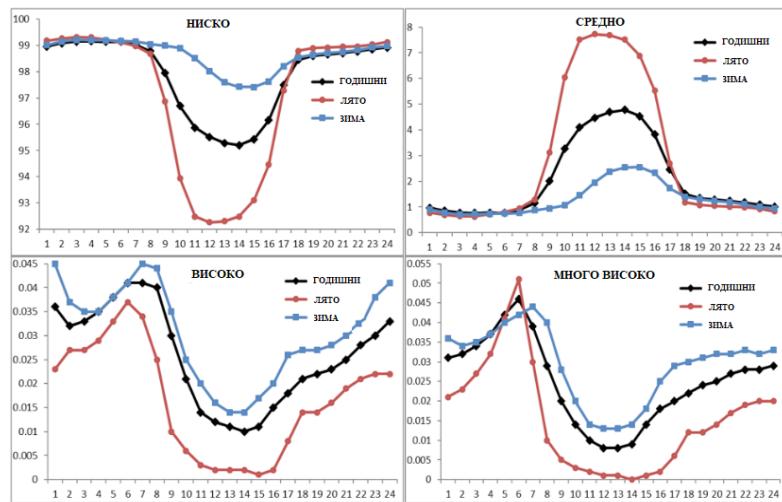
Представените резултати в настоящата статия са за изчисления ИЗ, неговата годишна и сезонна повторяемост както и определяне на доминантните замърсители определящи съответната категория и тяхното разпределение и повторяемост, за целия период на симулации от 2008-2020 година.

Резултати

Представените резултати в статията са относно поведението на ИЗ осреднени за територията на град София. Представени са полета на ИЗ групирани по категории, като са избрани часове от денонощие, които се смятат за представителни и отразявачи денонощния ход. Фигура 3 презентира полета на годишни и сезонни вариации на повторяемостта на категориите („Ниско“, „Средно“, „Високо“ и „Много Високо“) на ИЗ, осреднени върху целия домейн. Повторяемостта на категория „Ниско“ е около 90-99% върху цялата територия, през целия ден и през всички сезони. Останалите 10% от случаите са разпределени между другите категории. Може да се забележи някакъв дневен ход в категория „Средно“ с повторяемост над 10% през лятото и около 3-5% през зимните месеци и годишните полета. Високата повторяемост през летните месеци в тази категория се дължи предимно на разпределението на O_3 . Поведението на приземният O_3 е сложно и над България, до голяма степен то се дължи на пренос от чужбина (Gadzhev et al. 2013b). Поради този факт, както и поради O_3 фотохимични реакции, концентрациите на O_3 в сутрешните часове са по-ниски (заради слаб турбулентен транспорт от по-високите нива) и високи по обяд и следобедните часове. За категориите „Високо“ и „Много Високо“, полетата показват ниска повторяемост, но въпреки това разпределението в сутрешните и следобедните часове, особено през зимата е такова, че състоянието на атмосферния въздух е влошено. Категорията „Много Високо“ има повторяемост която достига до 10% в някой точки от града, в сутрешните часове. Високата повторяемост на категориите „Високо“ и „Много Високо“ през зимата са главно поради стабилността на атмосферата през тези месеци, което от своя страна води до възпрепятстване на турбулентността и така замърсителите са затруднени да се изкачват във височина и по често се задържат на приземно ниво. На Фигура 4, са представени графики отразявачи отново разпределението на повторяемостта на категориите на ИЗ, но този път много добре се описва денонощният им ход. Отново се вижда повторяемостта на категория „Ниско“ от 90-99% за целия домейн и през всички сезони, като тук вече може ясно да се очертава и локален минимум в обедните часове, като най голям той е през лятото, а най малък през зимата. Напълно противоположно е разпределението на повторяемостта в следващата категория „Средно“, където се вижда ясен максимум около обяд, почти 8% през лятото и 3-5% през зимата и на годишно осреднените резултати. Както вече беше споменато и по нагоре, причините за това са O_3 концентрации и разпределение. При категориите „Високо“ и „Много Високо“, повторяемостта е сравнително ниска, като се открояват два максимума в сутрешните и следобедните часове (интензивен пътен трафик), и особено през зимата, поради стабилността на атмосферата.

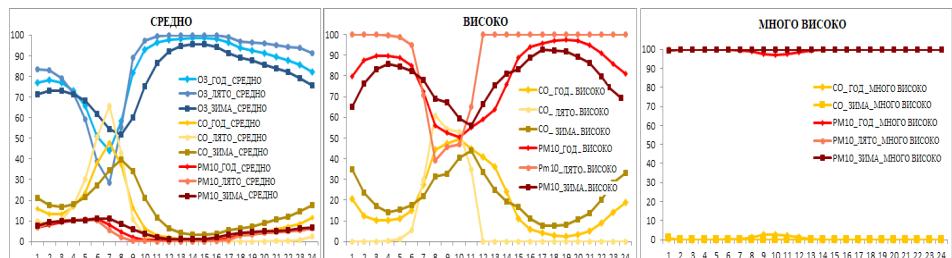


Фиг. 3. Годишна/сезонна повторяемост на категориите на ИЗ (%) за територията на гр. София, за период 2008-2020г в избраните часове (06:00, 12:00, 18:00 GMT).



Фиг. 4. Годишни/сезонни „типови“ дневни вариации (в %) на повторяемостта на ИЗ за всяка категория, осреднени за София град за периода 2008-2020 г.

Фигура 5 представя графики отразяващи повторяемостта на случаите, в които даден замърсител доминира при всяка една от категориите. Както вече беше споменато в Методологията, ИЗ се изчислява и определя на база 5 замърсителя и именното тези 5 замърсителя са разгледани в следващите графики, като е определено кой от тях е доминиращ за въпросната категория. Повечето от случаите, както стана ясно от предните две фигури, са разпределени в категория „Ниско“, а само 10% са разпределени в категориите „Средно“, „Високо“ и „Много Високо“. Поради тази причина тук категория „Ниско“ не е представена и фокусът пада върху така наречените „лоши“ категории. За категория „Средно“ ясно се вижда, че водещият замърсител е O_3 , с най-високи стойности през лятото. O_3 е доминиращ замърсител през по-голямата част от деня, освен рано сутрин. В сутрешните часове с около 50% вероятност доминира CO и с 10% вероятност се вижда и разпределение на PM_{10} .



Фиг. 5. Годишна/сезонна повторяемост (%) на случаите в които всеки замърсител доминира при образуването на всяка категория за територията на София за периода 2008-2020 г.

За категориите „Високо“ и „Много Високо“, O_3 няма никаква повтаряемост, което показва че за тези две категории отговорни са другите замърсители. Вижда се, че за категория „Високо“ доминира предимно PM_{10} с почти 100% повтаряемост, сутрин и следобед и около 50% по обяд. Вторият доминантен замърсител за тази категория е CO, с повтаряемост около 50% по обяд и 10-20% сутрин и следобед. За категория „Много Високо“ основен доминиращ замърсител е PM_{10} с повтаряемост от 100% през целия ден и всички сезони.

Заключение

Резултатите от числените симулации показват, че ИЗ попада предимно в две категории – „Ниско“ и „Средно“. Въпреки това, повтаряемостта на случаите с високо замърсяване достигат до 10% за някой точки по територията на град София.

Повтаряемостта на категория „Ниско“ е над 90% над целия град, през целият ден и през всички сезони. Високата повтаряемост на категория „Средно“ е предимно по обедните часове и през лятото, като се дължи главно на O_3 концентрации.

За категориите „Високо“ и „Много Високо“, висока повтаряемост се наблюдава през зимните месеци в сутрешните и следобедните часове, когато е и най-интензивен автомобилният трафик в натоварените часове и заради по-често стабилната атмосфера през зимата (възпрепятстван турбулентен транспорт на замърсителите във височина).

Резултатите за повтаряемостта на различните замърсители водещи до формирането на всяка категория показват, че O_3 и CO са доминиращи замърсители за категория „Средно“, PM_{10} е единствения доминиращ замърсител със 100% повтаряемост за категория „Много Високо“.

Освен тези общи характеристики, климатичното поведение на вероятностите на ИЗ е доста сложно, със значителна пространствена, сезонна и деновонощна вариабилност. Районите с по занижено качество на атмосферния въздух, не са непременно свързани с големите източници на замърсяване. Широките крайградски и дори планински райони също могат да имат значителна повтаряемост на ИЗ в категория „Средно“.

Благодарности

Настоящото изследване е проведено във връзка с изпълнението на Национална научна програма (ННП) „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“, одобрена с Решение на МС № 577/17.08.2018 г. и финансирана от МОН (Споразумение № Д01-363/17.12.2020). Специални благодарности на US EPA and US NCEP за предоставянето на свободни данни и софтуер и на Холандска организация за приложни научни изследвания (TNO) за предоставяне на Европейска инвентаризация на емисиите с висока разрешаваща способност.

Литература

- Byun, D., Ching, J., 1999. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. EPA Report 600/R-99/030, Washington DC. <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- Byun, D., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F. S. Binkowski, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, and C. Jang, 1998. Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, 10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, pp. 264-268.
- CEP (2003). Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina.
- Denier van der Gon, H., Visschedijk, A., van de Brugh, H., Droge, R., (2010). A high resolution European emission data base for the year 2005, TNO-report TNO-034-UT-2010-01895 RPT-ML, Apeldoorn, The Netherlands.
- Dudhia, J., 1993. A non-hydrostatic version of the Penn State/NCAR Mesoscale Model: validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. Mon. Wea. Rev. 121, pp. 1493-1513. <http://www.wrf-model.org/>
- Gadzhev G., K. Ganев, D. Syrakov, M. Prodanova and N. Miloshev 2013a. Some Statistical Evaluations of Numerically Obtained Atmospheric Composition Fields in Bulgaria, in the Proceedings of 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. 6-9 May 2013, Madrid, Spain, 373-377.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M.: Numerical, 2013b. Study of the Atmospheric Composition in Bulgaria, Computers and Mathematics with Applications 65, 402-422.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M. 2014a. Some basic facts about the atmospheric composition in Bulgaria - Grid computing simulations. Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 8353 LNCS, pp. 484-490
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M. 2014b. Analysis of the processes which form the air pollution pattern over Bulgaria. Lecture Notes in Computer Science (subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 8353 LNCS, pp. 390-396.
- Gadzhev G., Ganev K., Miloshev N. 2015a. Numerical study of the atmospheric composition climate of Bulgaria – validation of the computer simulation results. Int. J. Environment and Pollution, Vol. 57, Nos. 3/4, pp. 189-201.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M. 2015b. HPC simulations of the fine particulate matter climate of Bulgaria. Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 8962, pp. 178-186.
- Gadzhev G., Ganev K., Mukhtarov P., 2020. Statistical Moments Of The Vertical Distribution Of Air Pollution Over Bulgaria. I. Lirkov and S. Morgenov (Eds. (sad) LSSC 2019, LNCS 11958, pp. 213–219, 2020. https://doi.org/10.1007/978-3-030-41032-2_24
- Gadzhev G., Ganev K., Mukhtarov P., 2021a. HPC Simulations of the Atmospheric Composition Bulgaria's Climate (on the example of coarse particulate matter pollution), HPC 2019, SCI 902, pp. 221-233, (2021) https://doi.org/10.1007/978-3-030-55347-0_19

- Gadzhev G., V. Ivanov, K. Ganev, 2021b. Modelling of dry and wet deposition processes for the Sulphur and Nitrogen compounds over Bulgaria, The 20th conference on „Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes“ was held in Tartu, Estonia, in June 2021.
- Gadzhev G. and K. Ganev., 2018a. VERTICAL STRUCTURE OF SOME POLLUTANT OVER BULGARIA - OZONE AND NITROGEN DIOXIDE. SGEM 2018, 18, 4.3, (2018), ISBN:978-619-7408-70-6, ISSN:1314-2704, DOI:10.5593/sgem2018/4.3, pp. 449-454.
- Gadzhev G. and K. Ganev., 2018b. Vertical structure of atmospheric composition fields over Bulgaria, International Conference on „Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications“ (NMSCAA'18), Hisarya. Bulgaria, 27 – 31 May 2018, pp. 38-41.
- Gadzhev G. and K. Ganev., 2019. VERTICAL STRUCTURE OF AIR POLLUTANT FIELDS OVER BULGARIA, 19th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (Harmo'19) 3-6 June 2019, Bruges, Belgium.
- Gadzhev G. and V. Ivanov, 2020. MODELLING OF THE SULPHUR AND NITROGEN DEPOSITIONS OVER THE BALKAN PENINSULA BY CMAQ AND EMEP-MSC-W – PRELIMINARY RESULTS, (2020), Proceeding of 1st Internationa conference on ENVIRONMENTal protection and disaster RISKS, 29-30 September 2020, Sofia, Bulgaria, ISBN 978-619-7065-38-1, pp. 90 – 100, <https://doi.org/10.48365/envr-2020.1.8>
- Gadzhev G. and V. Ivanov, 2021. Modelling of the Seasonal Sulphur and Nitrogen Depositions over the Balkan Peninsula by CMAQ and EMEP-MSC-W, N. Dobrinkova and G. Gadzhev (eds.), Environmental Protection and Disaster Risks, Studies in Systems, Decision and Control 361, (2021), pp. 171 – 183, https://doi.org/10.1007/978-3-030-70190-1_12
- Gadzhev, G., 2018. Recurrence of Air Quality for the city of Sofia for 2013 and 2014, Bulgarian Geophysical Journal, 41, 46–58.
- Gadzhev, G., 2020. PRELIMINARY RESULTS FOR THE RECURRENCE OF AIR QUALITY INDEX FOR THE CITY OF SOFIA FROM 2008 TO 2019, Proceeding of 1st International conference on ENVIRONMENTal protection and disaster RISKS, 29-30 September 2020, Sofia, Bulgaria, ISBN 978-619-7065-38-1, 53 – 64, <https://doi.org/10.48365/envr-2020.1.5>
- Gadzhev, G., 2021. The Seasonal Recurrence of Air Quality Index for the Period 2008-2019 Over the Territory of Sofia City, Dobrinkova and G. Gadzhev (eds.), Environmental Protection and Disaster Risks, Studies in Systems, Decision and Control 361, 161–170, https://doi.org/10.1007/978-3-030-70190-1_11
- Georgieva, I., Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Miloshev, N. 2014. Numerical study of the air quality in the city of Sofia -Some preliminary results. Int. J. Environment and Pollution, Vol. 57, Nos. 3/4, pp, 162-174.
- Georgieva, I., Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Miloshev, N. 2015. Numerical study of the Air Quality in the city of Sofia, 8th Congress of the Balkan Geophysical Society, BGS 2015.
- Georgieva, I and Ivanov V. 2017. Air Quality Index Evaluations for Sofia city, IEEE EUROCON 2017 – 17th IEEE International Conference on Smart Technologies, IEEE EUROCON 2017, pp. 920-925.
- Georgieva, I., Ivanov, I., 2018. Computer simulations of the impact of air pollution on the quality of life and health risks in Bulgaria, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 64, Nos. 1/3, 2018, pp. 35-46.
- Leeuw, F. de, Mol, W., (2005). Air Quality and Air Quality Indices: a world apart. ETC/ACC Technical Paper 2005/5 http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACC_TechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf

- Shamarock et al., 2007. "A description of the Advanced Research WRF Version 2", http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Ganev, K., Miloshev, N., Slavov, K., 2012. Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1487, p. 88 - 94; DOI: 10.1063/1.4758945
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., 2013a. Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to Sofia city, American Institute of Physics, Conf. Proc. 1561, p. 120-132, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4827221>
- Syrakov, D., Prodanova, M., Slavov, K., Etropolska, I., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov, T. 2013b. Bulgarian System for Air Pollution Forecast. J. Int. Sci. Publ.: Ecol. Saf., 7 (1), 325-334.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Etropolska, I., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov, T. (2014a). A Multi- Domain Operational Chemical Weather Forecast System. In: Lirkov I. et al. (eds.) Large-Scale 52 Dimiter Syrakov, Maria Prodanova1, Emilia Georgieva Scientific Computing, LNCS 8353, 413–420. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Etropolska, I., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., 2014a. A multi-domain operational chemical weather forecast system, Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), Volume 8353 LNCS, 2014b, Pages 413-420.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Georgieva, E., Etropolska, I., Slavov, K., 2014b. Impact of NOx emissions on air quality simulations with the Bulgarian WRF-CMAQ modelling system, HARMO 2014 - 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Proceedings 2014, Pages 187-190.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Georgieva, E., Etropolska, I., Slavov, K., 2015. Impact of NOx emissions on air quality simulations with the Bulgarian WRF-CMAQ modelling system, International Journal of Environment and Pollution, Volume 57, Issue 3-4, 2015, Pages 285-296.

Annual and seasonal reccurance of the air quality index for the territory of sofia city

I. Georgieva

Abstract. Based on 3D modelling tools, an extensive database was created and used for different studies of atmospheric composition. All the simulations were conducted with a sufficiently high resolution and with the help of the most modern modeling tools, models from the globally used US EPA Model-3 system. This gave the opportunity to conduct extensive studies on a fully competitive modern level of the climate of atmospheric composition in the country with special focus on urban area. A statistically significant ensemble of Air Quality indexes (AQI) was calculated, and their typical recurrence, space, and temporal variability for the territory of the Sofia city was constructed. The AQ impact on human health is evaluated in terms of AQI, which gives an integrated assessment of the impact of pollutants. All the AQI evaluations are based on air pollutants concentrations obtained from the numerical modelling.

ЗАМЪРСЯВАНЕ НА АТМОСФЕРНИЯ ВЪЗДУХ С ФИНИ ПРАХОВИ ЧАСТИЦИ (ФПЧ) – АНАЛИЗ НА РЕЗУЛТАТИТЕ ОТ КОМПЮТЪРНИ СИМУЛАЦИИ ЗА БЪЛГАРИЯ И СОФИЯ ГРАД

И. Георгиева¹, Н. Милошев¹

¹ Национален Институт по Геофизика, Геодезия и География, Българска Академия на Науките, ул. Акад. Георги Бончев, блок 3, София, България, e-mail: iivanova@geophys.bas.bg

DOI: 10.34975/bgj-2021.44.1

Абстракт. В последно време, при изучаване на атмосферното замърсяване, особен интерес, поради доказаната вреда за Човешкото Здраве (ЧЗ), предизвикват праховите аерозоли (ФПЧ). Темата е особено актуална за България и град София, където системно се регистрират неколкократни превищения на нормите за концентрации на ФПЧ. Целта на настоящата работа е провеждането на надеждни, изчерпателни и детайлни изследвания на полетата на приземни концентрации на ФПЧ, ролята им при формиране на Индекса на Замърсяване и връзката им с процесите, които ги обуславят. В статията са представени следните резултати: Изясняване на пространствената и времева изменчивост на полетата на концентрации на ФПЧ и установяване на връзките им с метеорологичните условия и източниците на замърсяване; Обогатяване на знанията за взаимодействията на процесите, формиращи замърсяването с ФПЧ; Открояване на случаи с най-неблагоприятно замърсяване с ФПЧ - „горещи точки“ и най-неблагоприятни синоптични епизоди и изясняване ролята на синоптичните условия и локалните метеорологични процеси.

Ключови думи: замърсяване на атмосферния въздух, фини прахови частици (ФПЧ), индекс на замърсяване, климат на замърсяване.

Въведение

В настоящата работа са проведени надеждни, изчерпателни и детайлни изследвания на полетата на приземни концентрации на ФПЧ, изяснена е ролята им при формиране на ИЗ и връзката им с процесите (атмосферна динамика и химически трансформации), които ги обуславят. Надеждни и изчерпателни изследвания озна-

чава използването на статистически значими ансамбли от компютърно симулирани данни, отразяващи многообразието на метеорологични условия с тяхната типична повтаряемост, които съчетани с компютърно симулираните данни за концентрации на ФПЧ, да позволяват да се правят надеждни изводи относно техните характерни особености и поведение, влиянието им върху ИЗ и влиянието на характеристиките на атмосферната динамика върху тях. Откроени са най-неблагоприятните случаи на замърсяване с ФПЧ - „горещи точки“ и е анализирана ролята на синоптичните условия и локалните метеорологични процеси за формирането им. Детайлни изследвания означава достатъчно висока пространствено/временна разрешаваща способност на полетата, която да даде възможност да бъде отразен мултимасшабния характер на процесите, да се уловят взаимодействията на явленията с различни машаби и да се проследят основните източници, механизми и пътища за формиране на замърсяването с ФПЧ. Извършени са изследвания за територията на цялата страна, но със специален акцент върху градска среда (град София), които отразяват нейната специфичната климатология и екология. Ансамблите, обхващащи симулации за период от 7 години (от 2008 до 2014 година) се смятат за статистически представителни и отразяват основните черти на локалния/регионален климат, както на атмосферната динамика, така и на качеството на въздуха. Основният изследователски подход е съвместен анализ и статистическо третиране на полетата на замърсяване с ФПЧ и регионалните/локални метеорологични полета. В статията са представени резултати разделени по следния начин: Климат на замърсяването с ФПЧ; Особено неблагоприятно приземно замърсяване с ФПЧ и връзката му с метеорологичните условия; Изследване на произхода на замърсяване с ФПЧ в град София и Изследване приноса на отделните динамични, химични и аерозолни процеси за формиране на замърсяване с ФПЧ.

Методология

Анализ на тримерните полета на концентрации на ФПЧ, получени със средствата на компютърно симулиране. Използвана е световно призната система от модели US EPA Models 3 System, състояща се от 3 модела – WRF <http://www.wrf-model.org/>, Skamarock et al. (2007), Dudhia, J. (1993), CMAQ Byun and Ching (1999), Byun et al. (1998) и SMOKE <http://www.smoke-model.org/>, CEP (2003). Европейската и Национална нормативна база няма стриктни и определени изисквания и дефиниции за моделите, с които да се правят симулации за състава на атмосферата, това е и причината да има и да се използват изключително голям набор от такива модели. Тези модели са различни по сложност и разполагат с различна физическа основа, и са приспособени към многообразието на машабите на пренос - от глобален до локален машаб в много различни разработени за състава на атмосферата в България (Gadzhev et al. 2013, 2014a, 2014b, 2015a, 2015b, 2020, 2021a, 2021b), (Gadzhev G. and K. Ganev., 2018, 2019a, 2019b), (Gadzhev G. and V. Ivanov 2020, 2021).

Обект на изследването е територията на цялата страна, но с акцент върху изследванията в градска среда (град София), които да отразяват нейната специфична климатология и екология. Обработката и анализа на генерираните ансамбли от ме-

теорологични полета и такива на концентрации на ФПЧ с разрешаваща способност от 1 км. за района на град София са извършени.

На база получените концентрации от компютърното моделиране е изчислени индекс на замърсяване (ИЗ). Един от най-често използваните ИЗ е Британският дневен индекс за качество на въздуха (Leeuw, F. de, Mol, W., 2005), използван и в България (Syrakov et al. 2012, 2013, 2014a, 2014b, 2015), (Gadzhev, G., 2018, 2020, 2021), (Georgieva, I., 2014), (Georgieva et al. 2015), (Georgieva, I. and Ivanov, V., 2017, 2018) and (Ivanov, V. and Georgieva, I., 2017).

Инвентаризацията на Холандската организация за приложни научни изследвания (TNO) за 2010 г. (Denier van der Gon et al., 2010) се използва частично за територията на България, като за София град се използва Националната инвентаризация за 2010 г., предоставена от Българската изпълнителна агенция по околна среда. В инвентаризацията на TNO, антропогенните източници са разпределени в 10 SNAP категории (Избрана номенклатура за замърсяване на въздуха), класифицирайки ги според процесите, водещи до изпускане на вредни материали в атмосферата (EMEP/CORINAIR, 2002). Инвентаризацията на TNO от 2010 г. има разделителна способност $0,125^\circ \times 0,0625^\circ$ (около 7×8 km). На база на разделението на емисиите по категории източници е определен приноса на всяка от категориите към концентрациите на ФПЧ.

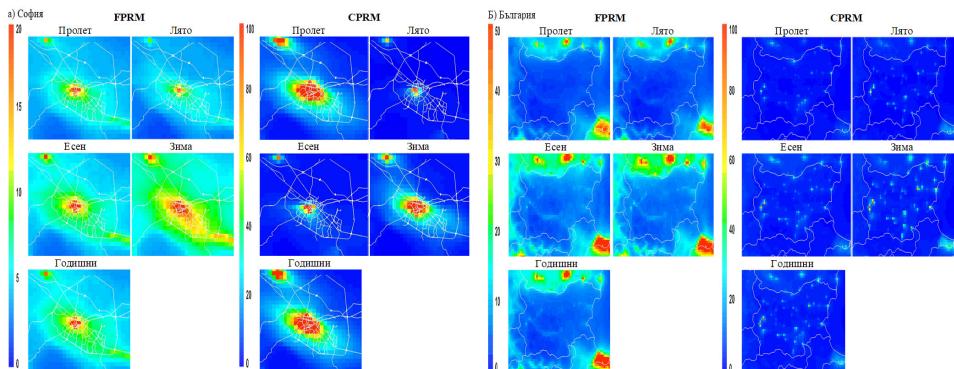
Моделът CMAQ, има опция “Integrated Process Rate Analysis”, която дава възможност да се оцени ролята и на всеки от динамичните и химични процесите формиращи атмосферното замърсяване. По този начин изменението на концентрацията за даден интервал от време може да се представя като сума от приноса на различните процеси. Включването на опцията за изследването на приносите на отделните процеси, дава възможност да се определят не само приносите на отделните процеси за определен замърсител, но също така и за група от замърсители каквато е групата на Праховите частици. Чрез обработката на компютърно симулираните полета на приносите на различните процеси към почасовото изменение на приземните концентрации на ФПЧ могат да се обогатят знанията за сложното взаимодействие на динамичните, химични и аерозолни процеси, формиращи замърсяването с ФПЧ. Разглеждането на взаимодействието и приноса на тези процеси дава възможност за обяснение на общата картина на замърсяване с ФПЧ както за територията на България, така и за София.

Резултати

Прахта е един от основните замърсители на въздуха, като основните ѝ източници са промишлеността, транспорта и енергетиката. Естествено тя има вредно влияние върху човешкото здраве, което зависи главно от размера и химичния състав на праховите частици. По-едните прахови частици (от 2.5 μm до 10 μm - PM10) при попадане в организма чрез дихателната система, се задържат в горните дихателни пътища, а по-фините (под 2.5 μm - PM2.5) достигат до по-ниските отдели на дихателната система и водят до увреждане на тъканите в белия дроб. В настоящата ста-

тия праховите частици с размер под 2.5 μm са наречени фини (FPRM), а тези с размер от 2.5 μm до 10 μm - едри прахови частици (CPRM). С наредба № 12 от 15 юли 2010 г. за норми за серен диоксид, азотен диоксид, фини прахови частици, олово, бензен, въглероден оксид и озон в атмосферния въздух в сила от 30.07.2010 г., (Обн. ДВ. бр. 58 от 30 Юли 2010 г., изм. и доп. ДВ. бр. 48 от 16 Юни 2017 г., изм. и доп. ДВ. бр. 79 от 8 Октомври 2019 г.) са приети норми за пределно допустими концентрации (ПДК) за ФПЧ. Въведените ПДК целят предпазване от техния вреден ефект върху здравето на хората и околната среда. FPRM - 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ Средно годишна Норма (СГН); CPRM - 50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ Средно Дневна Норма (СДН) и 40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ Средно годишна Норма (СГН).

Климат на замърсяването с ФПЧ: Основната цел е да се изясни пространствената и времева (денонощна, сезонна) изменчивост на основните характеристики на полетата на приземни концентрации на ФПЧ и анализ на връзките им с метеорологичните условия. За това е извършен статистически анализ на получените ансамбли от двумерни полета на изчислените концентрации на ФПЧ Фигура 1. Изчислена е плътността на вероятността за концентрациите на ФПЧ, пресметнати са статистическите моменти (средни и дисперсии по ансамбъл), максимуми, персентили с тяхната пространствена и времева (сезонна, денонощна) изменчивост Фигура 2.

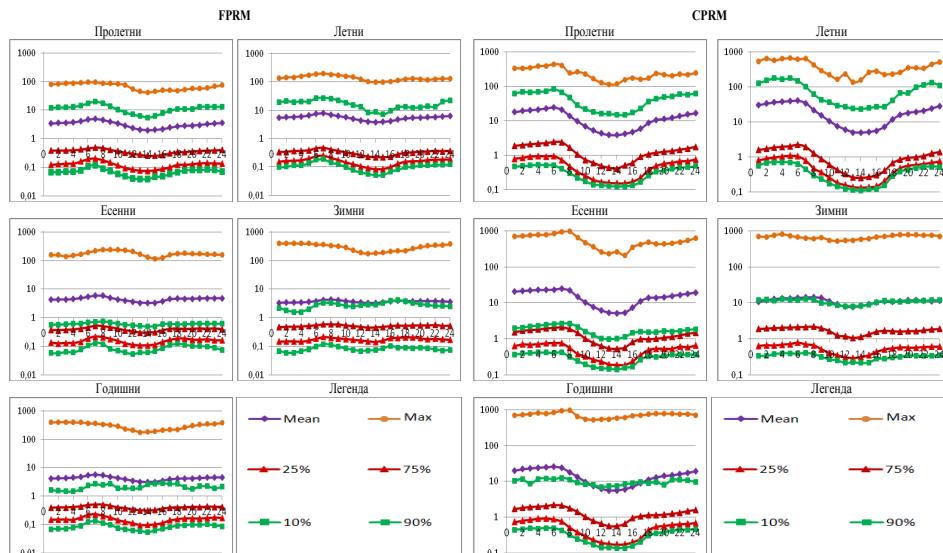


Фиг. 1. Двумерни полета на изчислените концентрациите (годишно и сезонно осреднени) на ФПЧ Фигура 1А) FPRM/CPRM София и Фигура 1Б) FPRM /CPRM България за един избран час 07:00 UTC.

От фигурите добре се открояват районите с високи концентрации на ФПЧ, както за района на София така и за България. Вижда се, че и при двата случая се превишават ПДК, като причините за тези високи концентрации са различни и зависят от фактори като подложна повърхност, метеорологични условия, автомобилен трафик и сезонна обусловеност. От полетата за България се вижда, че като отделно открояващо се място с високи концентрации е главно района на град София. Друг район е ТЕЦ Марица Изток, както и по-големите градове в страната, особено

през зимните месеци. За София полетата на концентрациите на праховите частици (FPRM/CPRM), както на фините така и на едрите са високи в Централните части и Южните квартали. Като отделно място с висока концентрация се откроява и района на Костинброд в западните покрайнини. На места в споменатите райони на високи концентрации се достигат определените ПДК за FPRM, докато CPRM превишават ПДК в Центъра на града и района на Костинброд.

Компютърно симулирания ансамбъл е 7 годишен (от 2008 до 2014) и е достатъчно голям и изчерпателен за да позволява разнообразни статистически обработки. Представените осреднени концентрации не изчерпват информацията, която може да бъде извлечена от ансамбъла, затова са изчислени различни статистически характеристики, за цялата област София. По този начин са определени корелационни връзки и е направен качествен анализ на зависимостта на характеристиките на замърсяването с ФПЧ от метеорологичните полета и параметри. На Фигура 2 са представени графики показващи основни ансамблови характеристики на замърсяването, а именно сезонни и годишни характеристики за FPRM/CPRM, осреднени за област София град. На всички графики са изобразени средните концентрации, максимални по ансамбъл концентрации и кривите обозначени с 10%, 25%, 75% и 90%. Тези криви представляват имагинерни концентрации, за които съответно в 10%, 25%, 75%, 90% от случаите са били симулирани по-ниски концентрации. При така представените криви в интервала между 25% - 75% попадат 50% от случаите, а в интервала 10% - 90% попадат 80% от случаите. Изображените по този начин криви дават достатъчно добра представа за статистическите характеристики на ансамбъла – дисперсия, асиметрия, ексцес, без да бъдат показани явно.

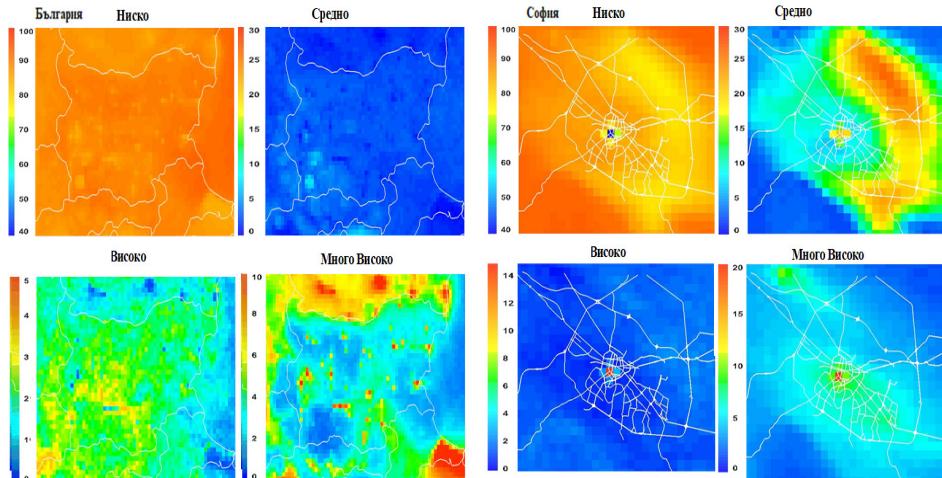


Фиг. 2. Статистически характеристики на осреднени приземни концентрации на FPRM/CPRM [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] за София.

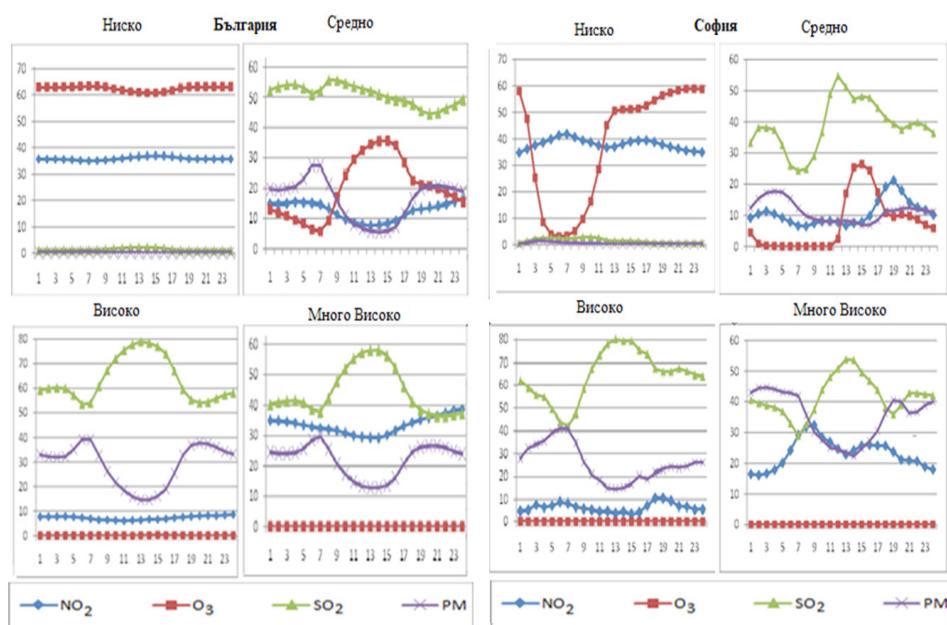
Графиките са представени в логаритмична скала. Вижда се, че средните концентрации са с добре изразени денонощен и сезонен ход и са асиметрично разположени в различните отрезъци от броя случаи през денонощето и през различните сезони. Средните концентрации попадат в интервала съдържащ 80% случаи през топлите месеци и над него през есента и през зимата съвпадат или са по-големи от 90% кривата. Абсолютните максимални и средни концентрации са най-високи през есента и зимата (устойчивата стратификация). В сутрешните часове има добре изразен максимум и минимум около обяд. Вероятна причина за този максимум са стабилната атмосфера и интензивния автомобилен транспорт сутрин. Източници на едри прахови частици са енергетиката и локалното отопление, които са най-интензивни през по-студените месеци. Фактът, че в много случаи линията на средните концентрации попада дори над линията 90% показва, че в останалите 10% от случаите концентрациите са изключително високи. Средните и абсолютните максимални концентрации на FPRM и CPRM са най-високи през есента и зимата поради устойчивата атмосфера и слабо изразения турбулентен транспорт във височина.

Изчисляване на ИЗ. Изясняване на ролята на замърсяването с ФПЧ за формиране на ИЗ. Очертаване на региони/епизоди при които ФПЧ са определящи за ИЗ: Качеството на въздуха се определя, като се конструира Индекс за качеството на въздуха (ИКВ), или още наречен индекс на замърсяване (ИЗ), показва до каква степен е чиста или замърсена средата, която дишаме и какви биха били последиците за здравето на хората. ИЗ е съставен и се измерва, за да се определи състоянието и качеството на въздуха, спрямо широкия кръг от замърсители, от който е съставен. Основна функция на ИЗ е оповестяването на реалното състояние на въздуха и обобщаването му в една цифра (например, изразена като цветна пиктограма или като код), като се дава възможност да се опише по един прост и разбираем за хората начин. ИЗ на атмосферния въздух дава интегрална оценка на влиянието на цялата съвкупност от замърсители върху човешкото здраве и се изчислява на базата на концентрацията на различните замърсители получена от измерване или числено моделиране. Предоставянето на информация за реалното качество на въздуха се осъществява, чрез преобразуване на концентрацията на замърсителите в индекс, който се определя за всеки замърсител поотделно и по различен начин. След преобразуването на концентрацията в индекс, се образува безразмерна скала, в която попада индексът и е свързана с интуитивен цветен код (напр. от зелено до червено) и лингвистично описание (например от много добро до много лошо). ИЗ се определя в няколко интервала за всеки, от който е линейна функция на концентрацията на съответните примеси (EPA, 2009). ИЗ в България се базира на концентрациите на 5 замърсителя: Озон (O_3), Азотен диоксид (NO_2), Серен диоксид (SO_2) и Прахови частици (PM10). По този начин е определен и изчислен и индекса на замърсяване, като резултатите са представени на Фигури 3 и 4. Пространственото и времево поведение на ИЗ е определен като всички симулации са представени като сума на всеки индекс във всяка една от категориите - Ниско, Средно, Високо и Много високо. В категорията Ниско въздуха е най чист, което означава, че високи стойности при полетата с повтаряемостта на дните с даден ИЗ, показват повече случаи с чист въздух, а ниските стойности означават

по-малко случаи с чист въздух, респективно – повече случаи със замърсен въздух. При останалите категории Средно, Високо и Много Високо, високите стойности показват повече случаи със замърсен въздух, а ниските – повече случаи с чист въздух.



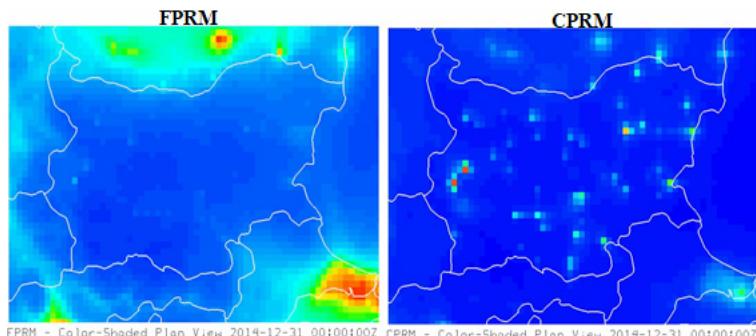
Фиг. 3. Повтаряемост на ИЗ в 4-те категории – годишно осреднени за България и София.



Фиг. 4. Годишно осреднени дневни вариации [%] на доминантните замърсители.

Фигура 3 полетата на повторяемостта на ИЗ за двете области, много добре описва териториите и районите със занижено качество на въздуха. За България те са предимно големите градове и административни центрове в страната, както и районите на ТЕЦ-те (Бобов дол и Марица Изток); за София се открояват предимно централните части на града, района на Костинброд, по-големите пътни артерии на Столицата и ТЕЦ-те Изток и София. На Фигура 4 са представени графики показващи дневните вариации на всеки един от замърсителите участващи в изграждането на ИЗ във всяка една от категориите. Вижда се ясно, че и при двете области София и България, открояваща доминантна роля имат фините прахови частици. В категориите Високо и Много високо, се открояват като втори доминантен замърсител, след серния диоксид, като е редно да се отбележи, че през различните сезони и в зависимост от метеорологичните условия, ФПЧ са доминантен замърсител, особено сутрин и следобед, и определят качеството на въздуха.

Особено неблагоприятно приземно замърсяване с ФПЧ и връзката му с метеорологичните условия: Изясняване на ролята на крупномашабните и локални метеорологични условия и процеси за формиране на особено неблагоприятно (екстремно) приземно замърсяване с ФПЧ. Направен е анализ на полетата на приземно замърсяване с ФПЧ и са разгледани случаи на най-неблагоприятно (екстремно) замърсяване – открояване на „горещи точки“. Анализирани са полетата на замърсяване с ФПЧ над двете области България и София град, и са определени открояващите се „горещи точки“ и за тези точки са представени полета на концентрации и графики със статистически характеристики. За територията на страната са определени „горещите точки“ Фигура 5, но представените графики са от района на град София, понеже това е областта с най-фина хоризонтална разрешаваща способност, а по територията на България те ще бъдат само изброени: Една от тези „горещи точки“ в страната е именно град София! Както се вижда и от полетата на концентрациите на двете фракции на праховите частици, ПДК се превишават, открояващите се райони са предимно големите градове (най-много над София), открояват се също ТЕЦ-те Марица Изток и Бобов дол.



Фиг. 5. „Горещи точки“ по територията на България и годишно осреднени концентрации на FPRM/CPRM за територията с разрешаваща способност от 9 км.

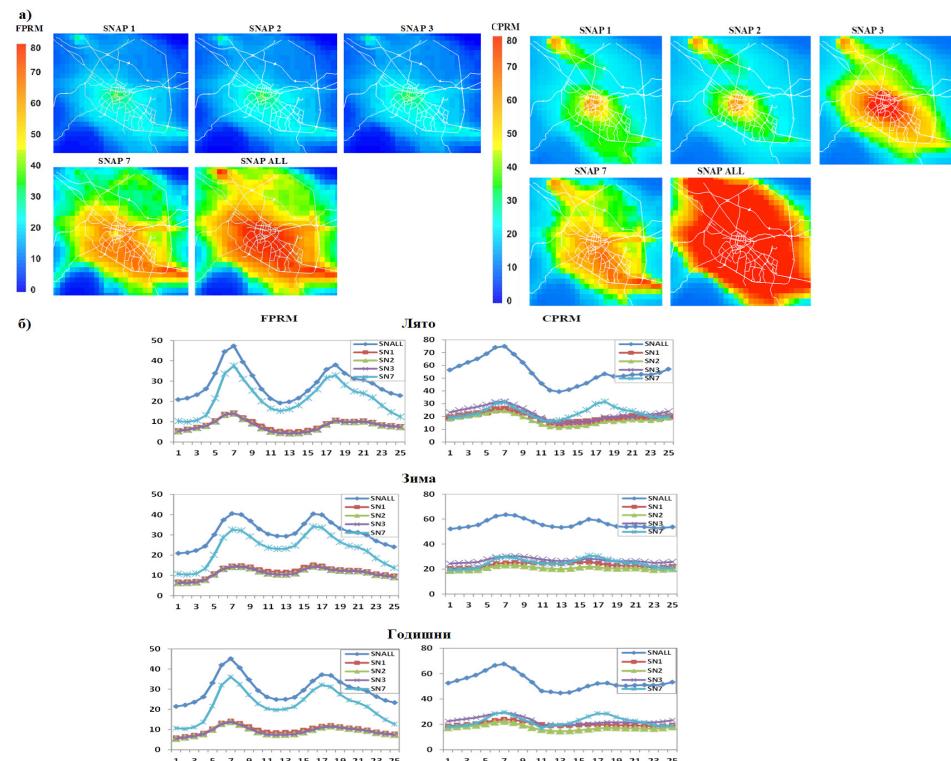
Представените полета на концентрациите на FPRM/CPRM осреднени за района на София (Фигура 6) показват, че „горещите точки“ от областта с високи стойности на концентрациите са Централните части на града (там се намира ТЕЦ София), ТЕЦ Изток в кв. Дружба и южната дъга на околовръстния път. Представителните точки за подбрани райони са ТЕЦ „София“ и ТЕЦ „Изток“ (кв. Дружба – югоизточна част). Тези райони се открояват и на симулациите при определяне ИЗ със занижено качеството на въздуха. Всички графики са представени в логаритмична скала. Графиките показват, че средните концентрациите са с добре изразени денонощен и сезонен ход и са асиметрично разположени в различните отрязъци от броя случаи през денонощието и през различните сезони. Средните концентрации



Фиг. 6. Статистически характеристики на годишно и сезонно осреднени приземни концентрации на FPRM/CPRM [$\mu\text{g}/\text{m}^3$] за избрани горещи точки: ТЕЦ София и ТЕЦ Изток.

попадат в интервала съдържащ 80% случаи през топлите месеци и над него през студените, като през зимата съвпадат с 90% кривата. Абсолютните максимални и средни концентрации са най-високи през есента и зимата, като вероятна причина за това е често устойчивата стратификация на атмосферата. В сутрешните часове има добре изразен максимум и минимум около обяд (стабилната атмосфера и интензивния автомобилен транспорт сутрин). Има добре изразен минимум през деня и максимум вечер. Източници на едри прахови частици са предимно енергетиката и локалното отопление, които са най-интензивни през по-студените месеци, когато поради стратификацията е възпрепятстван турбулентният транспорт на замърсители във височина и те се задържат в приземния слой.

Изследване на произхода на замърсяване с ФПЧ в град София: Чрез обработка на компютърно симулираните полета на приземни концентрации на ФПЧ за различни емисионни сценарии се оцени приноса на различните категории източници на атмосферно замърсяване към цялостната картина на замърсяването на град София с ФПЧ. Емисиите в използваната инвентаризация от 2010 година са за



Фиг. 7. а) Средно годишни приземни приноси на категориите SNAP1, SNAP2, SNAP3, SNAP7, SNAPALL [%] към изменението на приземните концентрации на FPRM/CPRM и **б)** Осреднени по ансамбъл годишни и сезонни приноси на отделните източници, водещи до изменението на FPRM и CPRM за София.

10 категории източници (SNAP) и това позволява да се оцени приноса на различните антропогенни дейности към общата картина на замърсяване с ФПЧ. В момента са налични ансамблови симулации за следните емисионни сценарии: SNAP1 - Енергетика; SNAP2 - Неиндустритални изгаряния; SNAP3 - Индустритални изгаряния; SNAP7 - Автомобилен транспорт и SNAPALL - включени емисии от всички категории източници. Направен е анализ за областта София град с разрешаваща способност от 1 км и инвентаризация на емисиите от 2010 година. Изчислен е относителния принос на всички категории източници към формиране на приземното замърсяване с ФПЧ. Представени са ансамбли от двумерни, зависещи от времето полета на относителните приносите на разглежданите SNAP категории към приземните концентрации на FPRM/CPRM, за София Фигура 7.

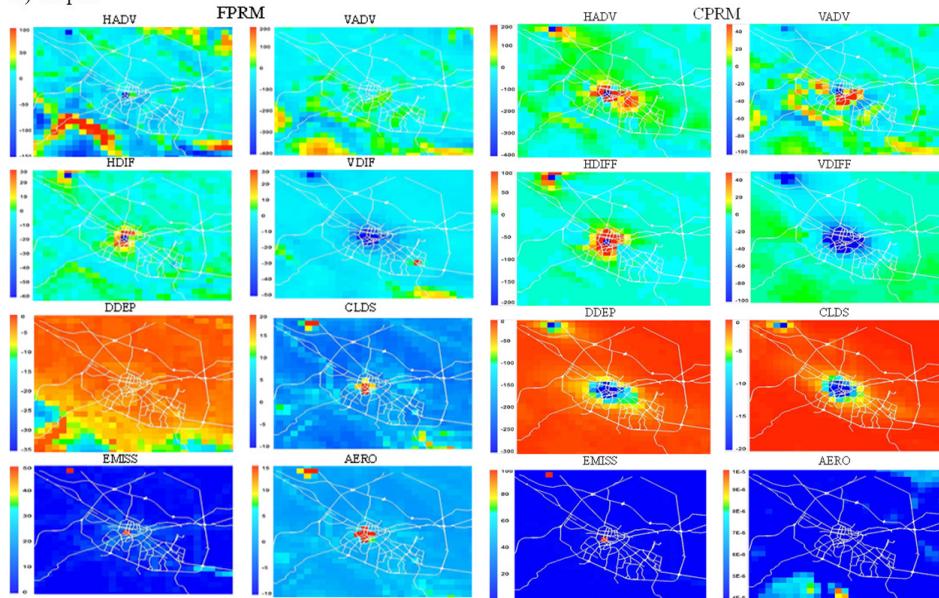
От полетата за средния годишен принос на емисиите от SNAP1, SNAP2 и SNAP3 за образуване на FPRM се вижда, че приносът през цялото деновонощие навсякъде е положителен. Средният принос за града е около 30%. Само над високите части на планините Витоша и Стара Планина той е минимален и почти нулев. Приносът е най-висок над централните части на града, южните квартали и района на Костинброд около 40%. Полетата за средния годишен принос на емисиите от Автомобилния транспорт SNAP7 водещ до изменение на концентрацията на FPRM показват, че приносът през цялото деновонощие навсякъде е положителен. Като в сутрешните и следобедните часове средният принос е максимален за града - около 50%, когато и транспорта е най-интензивен и пътните трасета са най-натоварени. Около обяд и през вечерта, приноса е по нисък в сравнение с другите часове, но въпреки това остава около 30% в централните части и началото на АМ Тракия както и основните пътни трасета в Столицата. От полетата за средния годишен принос на емисиите от всички категории източници SNAPALL водещ до изменение на приземните концентрации на FPRM, се вижда, че приносът през цялото деновонощие навсякъде е положителен и максимален. Достига стойности над 60% за цялата област освен над планините, където той е нулев. Приносът е максимален сутрин и следобед със стойности около 70%, в централните части и южните квартали, като с голям принос се откроява и района на района на Костинброд. От полетата за средния годишен принос на емисиите от отделните категории водещи до изменение на концентрацията на CPRM се вижда, че приносът на всички е положителен, и най-големи се открояват от SNAP3 и SNAP7. Над планините Витоша и Стара Планина приноса е минимален и почти нулев. Открояват се Централните части на града, южните квартали и района на Костинброд с принос около 60-70%, а средния принос за останалата част на града е около 40%. Всички категории имат положителен принос към изменението на концентрациите на FPRM/CPRM, но най-големи са приносите от автомобилния транспорт за FPRM и Индустриталните изгаряния за CPRM. Също така приносите имат много добре изразен деновонощен и сезонен ход, който може да се проследи и на графиките за Статистическия анализ на получените ансамбли от двумерни полета Фигура 7б. От фигурите за осреднените по ансамбъла годишни и сезонни приноси на отделните източници, водещи до изменението на приземните концентрации на FPRM и CPRM се вижда, че през отделните сезони приносът на различните типове източници е различен, но с почти еднакъв деновонощен ход. Доминиращият принос

за FPRM е този на източниците от всички снапове (SNALL) около 40%, следван от този на автомобилния транспорт (SN7) - около 30%. Приносът на останалите източници е около 10% през всички сезони. Денонощното разпределение показва, че максимален принос имат снаповете в сутрешните и следобедните часове, а минимален около обяд и през нощта. За CPRM навсякъде доминиращият принос е на източниците от всички снапове около 50%. Вторият по големина принос е на автомобилния транспорт, като в сутрешните часове, той се изравнява с приноса на емисиите от промишлеността. Най-големи стойности на приносите са в сутрешните часове през всички сезони, както и в следобедните часове. Най-малък принос имат източниците на Неиндустриалните изгаряния около 10%. За територията на град София относителните приноси имат добре изразен денонощен и сезон ход. Сезонният ход може да бъде различен за различните замърсители и да се мени в зависимост от източника. Може да се направи обобщен извод, че за образуването на ФПЧ доминират Автомобилния транспорт (SNAP7) и Индустрислните изгаряния (SNAP3). Приносът на емисиите от всички категории (SNAPALL) за цялата област София град, е по-малък от 100%, което означава, че част от концентрациите се формират и от източници, които са външни за областта в резултат на пренос през границите и.

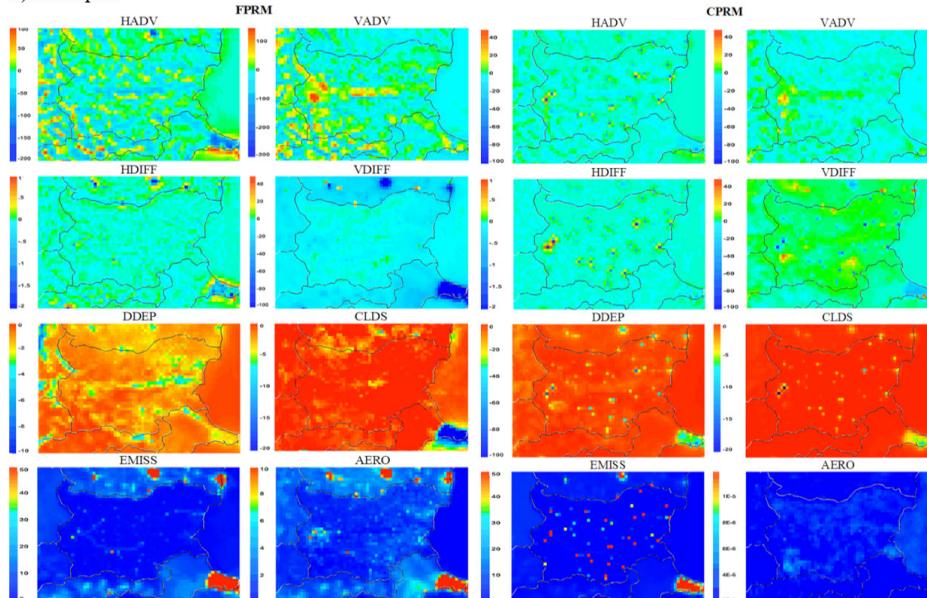
Изследване приноса на отделните динамични, химични и аерозолни процеси към формиране на замърсяването с ФПЧ. Атмосферното замърсяване се формира в резултат на взаимодействието на различни динамични и химични процеси. Чрез обработката на компютърно симулираните полета на приносите на различните процеси към почасовото изменение на приземните концентрации на ФПЧ се обогатят знанията за сложното взаимодействие на динамичните, химични и аерозолни процеси, формиращи замърсяването с ФПЧ.

Разглеждането на взаимодействието и приноса на тези процеси дава възможност за обяснение на общата картина на замърсяване с ФПЧ както за територията на България, така и за София. Различните процеси, които влияят върху формиране картина на замърсяване са: хоризонтална и вертикална дифузия, хоризонтална и вертикална адвекция, емисии, сухо отлагане, химически трансформации, аерозолни процеси, хетерогенна химия и облачни процеси, запазване/съхранение на маси. В тази част са представени резултати от компютърните симулации, оценяващи приноса на различните динамични процеси на пренос и трансформация на ФПЧ, които формират климата на замърсяването на въздуха за двете области. Извършен е статистически анализ на ансамблите от двумерни полета на относителни приноси на различните процеси към формиране концентрациите на ФПЧ. Моделът CMAQ, който е използван при симулациите има опция "Integrated Process Rate Analysis", която дава възможност да се оцени ролята на всеки от процесите споменати по-горе, при формиране на атмосферното замърсяване. По този начин изменението на концентрацията за даден интервал от време може да се представи като сума от приноса на различните процеси. Включването на опцията за изследването на приносите на отделните процеси, дава възможност да се определят не само приносите на отделните процеси за определен замърсител, но също така и за група от замърсители:

A) София



Б) България

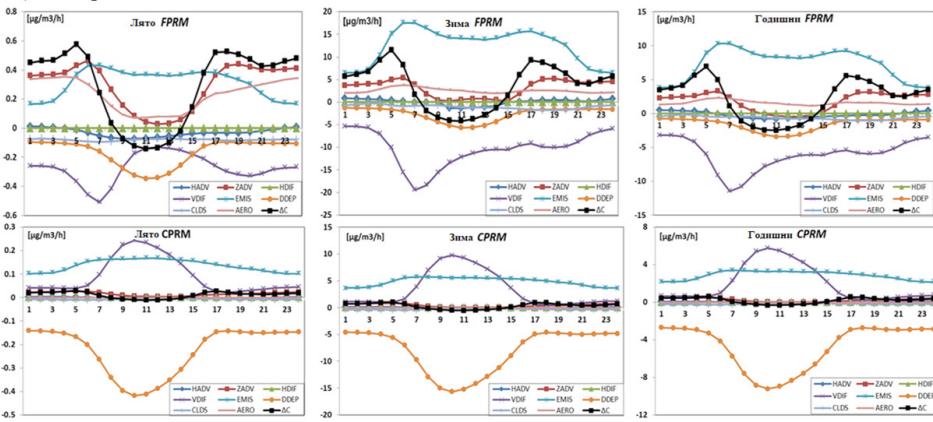


Фиг. 8. Осреднени годишни двумерни полета на приземните приноси на отделните процеси към изменението на концентрациите на FPRM/CPRM за териториите на А) София и Б) България.

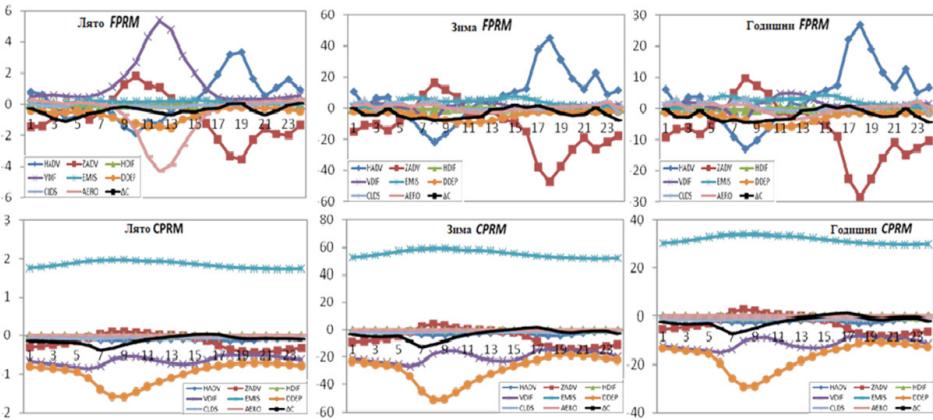
Една такава специфична група от замърсители са праховите частици, които модела може да раздели и разгледа като отделни фракции: CPRM = ACORS + ASEAS + ASOIL - Едири Прахови Частици (CPRM) и A2_5 = SO₄ + NH₄ + NO₃ + EC + (ORGA + ORGB) + PM2.5- Фини Прахови Частици (FPRM). Представени са резултати за двете групи праховите замърсители CPRM и FPRM (едри и фини прахови частици). От двумерните карти за приземните приноси на процесите водещи до образуването на ФПЧ, както за България, така и за София, могат да се направят следните изводи: Приносите на двойката Хоризонтална-Вертикална адвекция (HADV, VADV) са винаги в противофаза, което е отражение на уравнението на непрекъснатостта. И двете адвекции добре описват планинските части и релефа на областта, като естествено в полетата за София (с по-детайлната резолюция) ефекта е по-видим. Приносът на HADV към FPRM е отрицателен над планините и в центъра на града и положителен принос в подножията (добре се описва и на картите за България). Вертикалната адвекция (VADV) е в противофаза на Хоризонталната и тя има положителен принос по планините и отрицателен в подножията. Приносът на Хоризонталната дифузия (HDIF) е отрицателен над самите източници - ТЕЦ „София“, ТЕЦ „Изток“, ТЕЦ „Марица Изток и Бобов дол, а около тях е положителен. Най-добре тези ефекти се откриват на картите за CPRM за България. Вертикалната дифузия (VDIF) има положителен принос само над високите източници (ТЕЦ-те) при картите за София и FPRM, докато за CPRM на картите за България приноса на VDIF е отрицателен. Приносът на VDIF е отрицателен за FPRM /CPRM в центъра на София и района на Костинброд – където са по-ниски източници. Приносът на сухото отлагане (DDEP), естествено, е отрицателен за и за двете фракции, като най-голям е над ТЕЦ „Изток“ и Витоша планина за FPRM, а в централните части е почти нулев. При картите на CPRM, приносът на DDEP е най-голям и отрицателен в центъра на града и района на Костинброд. Приносът на облачните процеси (CLDS) също е отрицателен и най-голям над централните части и Костинброд за CPRM, докато на полетата за FPRM, приноса е положителен и максимален в тези райони за София, а на картите за България отрицателен е приноса е отрицателен над София и ТЕЦ „Бобов дол“, докато на другите места е почти нулев. Приносът на емисиите (EMIS) е положителен! За София той е най-голям в Центъра на града, района на Костинброд и началото на АМ Тракия и за двете фракции, а при картите за България той е максимален и положителен над големите градове и източниците на емисии. Приносът на аерозолните процеси (AERO) е положителен, като за FPRM той е най-голям в централните части и района на Костинброд, а за CPRM приносът на аерозолните процеси е изключително малък и за двете области. Както стана ясно от описането на полетата на средните приземни приноси, всички процеси имат различни по-големина приноси, със различни знаци в различни фази са и имат различни значения. Значението на „положителен“ принос, е че даденият процес допринася към повишение на концентрацията, докато „отрицателния“ принос, намаля концентрацията на дадения замърсител (в случая ФПЧ).

На графиките от Фигура 9, са представени осреднените приноси на различните процесите (HADV, ZADV, HDIF, VDIF, EMIS, DDEP, CLDS, CHEM, AERO), водещи до изменението на концентрацията на ФПЧ, осреднени за София и България.

A) България



Б) София



Фиг. 9. Годишно и сезонно осреднени приземни приноси на процесите водещи до изменението на концентрациите на ФПЧ (FPRM/CPRM) в [$\mu\text{g}/\text{m}^3/\text{h}$] за А) България и Б) София.

Сумарното изменение на процесите (ΔC) е изобразено с черен цвят на всички графики и се вижда, че то е както с положителен, така и с отрицателен знак и има добре изразен деновонощен ход. Стойностите на (ΔC) са различни през различните сезони и се определя от броя на процесите, които също са с различен знак и големина. За образуването на различните замърсители доминират различни приноси с различни стойности и именно това е проследено със следващите графики - кой принос на даден процес е доминиращ, по кое време на деновонощето и с какъв знак.

За България: за изменението на концентрацията на FPRM основен положителен принос имат EMIS през целия ден и VADV сутрин и следобед. HADV има почти нулев принос, а VDIF има изцяло отрицателен принос през всички сезони. DDFP е с отрицателен принос с максимум около обяд. AERO през всички сезони имат положителен принос. Вижда се че доминантният процес тук са EMIS особено през

зимните месеци. Сумарното изменение (ΔC) водещо до изменението на концентрацията на FPRM има изцяло положителен знак, като единствено през обедните часове той става много близък до нула, дори отрицателен. За образуването на CPRM основен положителен принос имат химичните процеси (CHEM), чиито стойности са най-големи от всички други, с максимум през зимните месеци и VDIF с максимум около обяд. DDEP има изцяло отрицателен принос. Сумарното изменение на процесите (ΔC) е както с положителен, така и с отрицателен знак за CPRM.

За София: за изменението на концентрацията на FPRM основен положителен принос имат VDIF през целия ден и VADV около обяд. Приносът на VADV в сутрешните и следобедните часове е отрицателен. HADV е в противофаза на VADV. DDEP е с отрицателен принос с максимум около обяд. AERO през всички сезони с изключение на зимата са с отрицателен принос. За образуването на CPRM основен положителен принос имат CHEM, чиито стойности са най-големи от всички други, с максимум през зимните месеци. VDIF и DDEP имат изцяло отрицателен принос. VADV в обедните часове има малък положителен принос, а в следобедните и сутрешните, той е отрицателен. През зимата процесите са по-активни в сравнение с другите сезони и също така се откроява този сезон с голям положителен принос на EMIS и намаляващ до отрицателен принос на VDIF. Останалите процеси имат почти нулев принос. Сумарното изменение на процесите (ΔC) е както с положителен, така и с отрицателен знак за CPRM и предимно с отрицателен знак за FPRM.

Заключение

Конструиран е климата на замърсяването с ФПЧ в различни мащаби, като се определиха и точки с особено неблагоприятно приземно замърсяване с ФПЧ. Изследвана е връзката на това замърсяване с метеорологичните условия. От получените резултати с компютърното моделиране беше изследван произхода на замърсяване с ФПЧ в град София, като се определиха източните на замърсяване, също така и се изясни ролята на отделните динамични, химични и аерозолни процеси за формиране на замърсяване с ФПЧ.

Числено получените полета за концентрация на ФПЧ показват няколократно превишаване на граничните стойности за концентрации основно в най-големия град в страната София.

Поведението на приземните концентрации, осреднени за целия ансамбъл годишно или за четирите сезона е разумно и демонстрира ефекти, които за повечето от съединенията могат да се обяснят от гледна точка на общоприетите схеми на динамични влияния (турбулентен транспорт, атмосферна стабилност), локални атмосферни циркулации или химични трансформации; Приземните концентрации на ФПЧ вероятно се дължат на приземните източници - най-вече на автомобилния транспорт; Инвентаризацията на емисиите на TNO е за 10 категории SNAP, които позволяват оценка и определяне на приноса на различни антропогенни дейности към цялостната картина на замърсяването. За всички категории емисии моделът на полетата за принос е доста сложен, което отразява конфигурацията на източника на

емисии, хетерогенността на топографията, използването на земята и метеорологични условия. Относителният принос на отделните типове източници на емисии към концентрацията на ФПЧ може да бъде доста различен. Приносът на различните категории емисии към приземните концентрации на ФПЧ има различен дневен ход и значение. Замърсяването на въздуха се формира в резултат на взаимодействието на различни процеси, така че познаването на приноса на всеки за различните процеси, метеорологични условия за дадена пространствена конфигурация на емисиите и временно поведение, са много полезни за разбирането на климата на замърсяването на въздуха, в частност климата на замърсяването с ФПЧ.

Резултатите, получени от “Integrated Processes Rate Analysis” демонстрират много сложното поведение и взаимодействие между различни процеси за FPRM и CPRM. По-нататъшен анализ на тези процеси, тяхната пространствена, денонощна и сезонна променливост и взаимодействие може да бъде полезен за обяснение на цялостната картина и произход на замърсяването в разглеждания регион. Общата промяна на концентрацията (ΔC), водеща до промяна в концентрацията, се определя главно от малък на брой доминиращи процеси, които имат големи стойности и могат да бъдат с противоположен знак и фази. Знакът на приноса на някои от процесите е очевиден, но някои от тях може да имат различен знак в зависимост от вида на емисиите, както и от метеорологичните условия и топография.

Благодарности

Настоящото изследване е проведено във връзка с изпълнението на Национална научна програма (ННП) „Опазване на околната среда и намаляване на риска от неблагоприятни явления и природни бедствия“, одобрена с Решение на МС № 577/17.08.2018 г. и финансирана от МОН (Споразумение № Д01-363/17.12.2020). Специални благодарности на US EPA and US NCEP за предоставянето на свободни данни и софтуер и на Холандска организация за приложни научни изследвания (TNO) за предоставяне на Европейска инвентаризация на емисиите с висока разрешаваща способност.

Литература

- Byun, D., Ching, J., 1999. Science Algorithms of the EPA Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System. *EPA Report 600/R-99/030, Washington DC.* <http://www.epa.gov/asmdnerl/models3/doc/science/science.html>.
- Byun, D., J. Young, G. Gipson, J. Godowitch, F. S. Binkowski, S. Roselle, B. Benjey, J. Pleim, J. Ching, J. Novak, C. Coats, T. Odman, A. Hanna, K. Alapaty, R. Mathur, J. McHenry, U. Shankar, S. Fine, A. Xiu, and C. Jang, 1998. Description of the Models-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System, *10th Joint Conference on the Applications of Air Pollution Meteorology with the A&WMA*, 11-16 January 1998, Phoenix, Arizona, pp. 264-268.
- CEP (2003). Sparse Matrix Operator Kernel Emission (SMOKE) Modeling System, *University of Carolina, Carolina Environmental Programs, Research Triangle Park, North Carolina*.

- Denier van der Gon, H., Visschedijk, A., van de Brugh, H., Droege, R., (2010). A high resolution European emission data base for the year 2005, *TNO-report TNO-034-UT-2010-01895 RPT-ML, Apeldoorn, The Netherlands*
- Dudhia, J., 1993. A non-hydrostatic version of the Penn State/NCAR Mesoscale Model: validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. *Mon. Wea. Rev.* 121, pp. 1493-1513.
- EMEP/CORINAIR, 2002. Atmospheric emission inventory guidebook, third edition, European Environmental Agency. <http://reports.eea.europa.eu/EMEPCORINAIR3/en/page002.html>
- EPA 2009. Technical assistance document for the reporting of daily air quality - the Air Quality Index (AQI). EPA- 454/B-09-001, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, Office of Air Quality Planning and Standards, Research Triangle Park, North Carolina 27711.
- Gadzhev G., K. Ganev, D. Syrakov, M. Prodanova and N. Miloshev 2013. Some Statistical Evaluations of Numerically Obtained Atmospheric Composition Fields in Bulgaria, in the *Proceedings of 15th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*. 6-9 May 2013, Madrid, Spain, 373-377.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M. 2014a. Some basic facts about the atmospheric composition in Bulgaria - Grid computing simulations. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 8353 LNCS, pp. 484-490.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M. 2014b. Analysis of the processes which form the air pollution pattern over Bulgaria. *Lecture Notes in Computer Science (subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 8353 LNCS, pp. 390-396.
- Gadzhev G., Ganev K., Miloshev N. 2015a. Numerical study of the atmospheric composition climate of Bulgaria – validation of the computer simulation results. *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 57, Nos. 3/4, pp. 189-201.
- Gadzhev, G., Ganev, K., Miloshev, N., Syrakov, D., Prodanova, M. 2015b. HPC simulations of the fine particulate matter climate of Bulgaria. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 8962, pp. 178-186.
- Gadzhev G., Ganev K., Mukhtarov P., 2020. Statistical Moments Of The Vertical Distribution Of Air Pollution Over Bulgaria. I. Lirkov and S. Margenov (Eds. (sad) LSSC 2019, LNCS 11958, pp. 213-219, 2020. https://doi.org/10.1007/978-3-030-41032-2_24
- Gadzhev G., Ganev K., Mukhtarov P., 2021a. HPC Simulations of the Atmospheric Composition Bulgaria's Climate (on the example of coarse particulate matter pollution), *HPC 2019, SCI* 902, pp. 221-233, (2021) https://doi.org/10.1007/978-3-030-55347-0_19
- Gadzhev G., V. Ivanov, K. Ganev, 2021b. Modelling of dry and wet deposition processes for the Sulphur and Nitrogen compounds over Bulgaria, *The 20th conference on „Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes“* was held in Tartu, Estonia, in June 2021.
- Gadzhev G. and K. Ganev., 2018a. VERTICAL STRUCTURE OF SOME POLLUTANT OVER BULGARIA - OZONE AND NITROGEN DIOXIDE. *SGEM 2018*, 18, 4.3, (2018), ISBN:978-619-7408-70-6, ISSN:1314-2704, DOI:10.5593/sgem2018/4.3, pp. 449-454.
- Gadzhev G. and K. Ganev., 2018b. Vertical structure of atmospheric composition fields over Bulgaria, *International Conference on „Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications“ (NMSCAA'18)*, Hisarya, Bulgaria, 27 – 31 May 2018, pp. 38-41.

- Gadzhev G. and K. Ganev., 2019. VERTICAL STRUCTURE OF AIR POLLUTANT FIELDS OVER BULGARIA, *19th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (Harmo'19)* 3-6 June 2019, Bruges, Belgium.
- Gadzhev G. and V. Ivanov, 2020. MODELLING OF THE SULPHUR AND NITROGEN DEPOSITIONS OVER THE BALKAN PENINSULA BY CMAQ AND EMEP-MSC-W – PRELIMINARY RESULTS, (2020), *Proceeding of 1st Internationa conference on ENVIROnmental protection and disaster RISKS*, 29-30 September 2020, Sofia, Bulgaria, ISBN 978-619-7065-38-1, pp. 90-100, <https://doi.org/10.48365/envr-2020.1.8>
- Gadzhev G. and V. Ivanov, 2021. Modelling of the Seasonal Sulphur and Nitrogen Depositions over the Balkan Peninsula by CMAQ and EMEP-MSC-W, N. Dobrinkova and G. Gadzhev (eds.), *Environmental Protection and Disaster Risks, Studies in Systems, Decision and Control 361*, (2021), pp. 171 – 183, https://doi.org/10.1007/978-3-030-70190-1_12
- Gadzhev, G., 2018. Recurrence of Air Quality for the city of Sofia for 2013 and 2014, *Bulgarian Geophysical Journal*, 41, 46-58.
- Gadzhev, G., 2020. PRELIMINARY RESULTS FOR THE RECURRENCE OF AIR QUALITY INDEX FOR THE CITY OF SOFIA FROM 2008 TO 2019, *Proceeding of 1st International conference on ENVIROnmental protection and disaster RISKS*, 29-30 September 2020, Sofia, Bulgaria, ISBN 978-619-7065-38-1, 53-64, <https://doi.org/10.48365/envr-2020.1.5>
- Gadzhev, G., 2021. The Seasonal Recurrence of Air Quality Index for the Period 2008-2019 Over the Territory of Sofia City, Dobrinkova and G. Gadzhev (eds.), *Environmental Protection and Disaster Risks, Studies in Systems, Decision and Control 361*, 161–170, https://doi.org/10.1007/978-3-030-70190-1_11
- Georgieva, I., Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Miloshev, N. 2014. Numerical study of the air quality in the city of Sofia -Some preliminary results. *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 57, Nos. 3/4, pp. 162-174.
- Georgieva, I., Gadzhev, G., Ganev, K., Prodanova, M., Syrakov, D., Miloshev, N. 2015. Numerical study of the Air Quality in the city of Sofia, *8th Congress of the Balkan Geophysical Society, BGS 2015*.
- Georgieva, I and Ivanov V. 2017. Air Quality Index Evaluations for Sofia city, *IEEE EUROCON 2017 – 17th IEEE International Conference on Smart Technologies, IEEE EUROCON 2017*, pp. 920-925.
- Georgieva, I., Ivanov, I., 2018. Computer simulations of the impact of air pollution on the quality of life and health risks in Bulgaria, *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 64, Nos. 1/3, 2018, pp. 35-46.
- Leeuw, F. de, Mol, W., (2005). Air Quality and Air Quality Indices: a world apart. ETC/ACC Technical Paper 2005/5 http://acm.eionet.europa.eu/docs/ETCACC_TechnPaper_2005_5_AQ_Indices.pdf
- Shamarock et al., 2007. “A description of the Advanced Research WRF Version 2”, http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v2.pdf
- Schwede, D., G. Pouliot, and T. Pierce 2005. Changes to the Biogenic Emissions Inventory System Version 3 (BEIS3), *Proc. of 4th Annual CMAS Models-3 Users's Conference*, September 26-28, 2005, Chapel Hill, NC.
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Ganev, K., Miloshev, N., Slavov, K., 2012. Operational Pollution Forecast for the Region of Bulgaria, *American Institute of Physics, Conf. Proc.* 1487, p. 88 - 94; DOI: 10.1063/1.4758945.
- Syrakov, D., Etropolska, I., Prodanova, M., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., 2013. Downscaling of Bulgarian Chemical Weather Forecast from Bulgaria region to

- Sofia city, *American Institute of Physics, Conf. Proc.* 1561, p. 120-132, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4827221>.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Etropolska, I., Slavov, K., Ganev, K., Miloshev, N., Ljubenov T., 2014a. A multi-domain operational chemical weather forecast system, *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, Volume 8353 LNCS, 2014, Pages 413-420.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Georgieva, E., Etropolska, I., Slavov, K., 2014b. Impact of NOx emissions on air quality simulations with the Bulgarian WRF-CMAQ modelling system, HARMO 2014 - 16th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, *Proceedings* 2014, Pages 187-190.
- Syrakov, D., Prodanova, M., Georgieva, E., Etropolska, I., Slavov, K., 2015. Impact of NOx emissions on air quality simulations with the Bulgarian WRF-CMAQ modelling system, *International Journal of Environment and Pollution*, Volume 57, Issue 3-4, 2015, Pages 285-296.

Fine particles (pm) air pollution - analysis of the results of computer simulations for bulgaria and sofia city

I. Georgieva and N. Miloshev

Abstract. Recently, in the study of air pollution, special attention has been paid to particulate matter (PM) because of great importance for the quality of life and Human Health (HH). The topic is especially relevant for Bulgaria and Sofia city, where the situation is especially severe regarding PM concentrations, where several times exceeded the limit values for concentrations. The research aims to provide a statistically reliable assessment of the atmospheric composition climate, particularly PM surface concentrations, the role in forming the Air Quality Index, and the relationship with the processes that determine. The following results are presented in the paper: Analysis of the spatial and temporal variability of the PM concentrations fields and behavior, the establishment of the connections with meteorological conditions and the pollution sources; Enrichment knowledge about the interactions of the processes forming the PM pollution; Highlighting cases with the most unfavorable PM pollution - „hot spots“ and the most unfavorable synoptic episodes, and clarifying the role of meteorological conditions and local processes.