

Nodweddu allyriadau atmosfferig

Philip Jonathan

Prifysgol Caerhirfryn, Adran Mathemateg ac Ystadegaeth

Cynhadledd Mathemateg Cymru
(Sleidiau : www.lancs.ac.uk/~jonathan)



Cydnabyddiaeth a throsolwg

Diolch

- Atmospheric monitoring services: Bill Hirst
- Caergrawnt: Clay Roberts, Oliver Shorttle, Kasey Mendel
- Shell : Matthew Jones, David Randell, Rutger Ijzermans

Gwrthdroad tebygoliaethol

- Braslun : Hirst et al. [2013b], Jones a Jonathan [2022]
- Y broblem ystadegol : Hirst et al. [2013a], Hirst et al. [2017]

Amcangyfrif [CH_4] o'r gofod

- Arsylwadau o nwyon **benthyg** (*surrogate*): Roberts et al. [2022]

Cynhesu byd eang : pa nwyon sy'n broblem?

GWP values and lifetimes	Lifetime (years)	Global warming potential, GWP		
		20 years	100 years	500 years
Methane (CH ₄)	12.4 ^[6]	56 ^[3] 72 ^[5] 84 / 86 ^{f[6]} 96 ^[7]	21 ^[3] 25 ^[5] 28 / 34 ^{f[6]} 32 ^[8] 39f (biogenic) ^[9] 40f (fossil) ^[9]	6.5 ^[3] 7.6 ^[5]
Nitrous oxide (N ₂ O)	121.0 ^[6]	280 ^[3] 289 ^[5] 264 / 268 ^{f[6]}	310 ^[3] 298 ^[5] 265 / 298 ^{f[6]}	170 ^[3] 153 ^[5]
HFC-134a (hydrofluorocarbon)	13.4 ^[6]	3710 / 3790 ^{f[6]}	1300 / 1550 ^{f[6]}	435 ^[5]
CFC-11 (chlorofluorocarbon)	45.0 ^[6]	6900 / 7020 ^{f[6]}	4660 / 5350 ^{f[6]}	1620 ^[5]
Carbon tetrafluoride (CF ₄ / PFC-14)	50,000 ^[6]	4880 / 4950 ^{f[6]}	6630 / 7350 ^{f[6]}	11,200 ^[5]
HFC-23 (hydrofluorocarbon)	222 ^[6]	12,000 ^[5] 10,800 ^[6]	14,800 ^[5] 12,400 ^[6]	12,200 ^[5]
Sulfur hexafluoride SF ₆	3,200 ^[6]	16,300 ^[5] 17,500 ^[6]	22,800 ^[5] 23,500 ^[6]	32,600 ^[5]
Hydrogen (H ₂)	4–7 ^[10]	N/A	4.3 ^[10]	N/A

en.wikipedia.org/wiki/Global_warming_potential

Ein hatmosffer

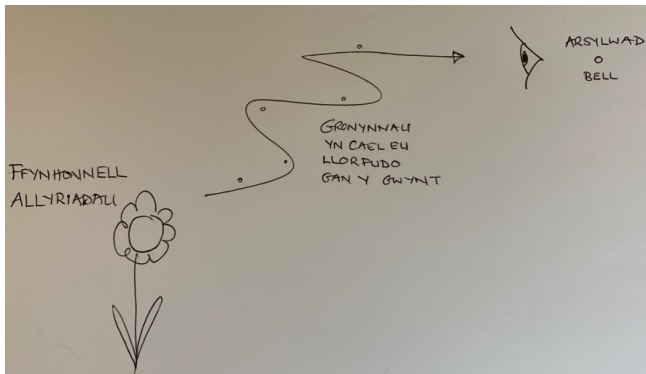
- [CO₂] ≈ 410 ppmv (heddiw)
- [CH₄] ≈ 1.90 ppmv (heddiw)
- [CO₂] ≈ 290 ppmv (yn 1750)
- [CH₄] ≈ 1.0 ppmv (yn 1750)
- Mâs atmosfferig CO₂ : CH₄ ≈ 600
- Oes CO₂ ∈ (20,200) mlynedd
- Oes CH₄ ≈ 12 mlynedd
- GWP: Potensial cynhesu byd eang
- CH₄ yn amsugno pelydiad thermol llawer yn well na CO₂

- Allyriadau CH₄ yn gyfrifol am o leiaf hanner y gwres ychwanegol a amsugnwyd o'i gymharu â'r cyfnod cyn-ddiwydiannol

Gwrthdroad tebygoliaethol

Probabilistic inversion

Beth yw'r broblem?



- Beth yw priodweddau'r ffynhonnell, wedi arsylwadau ansicr o'r crynodiad o bell a maes y gwynt?

Systemau synhwyro CH_4

Awyren

Hirst et al. [2013a] (Sander Geophysics)



Llinell golwg

Hirst et al. [2017], Hirst et al. [2020] (Boreal Laser)



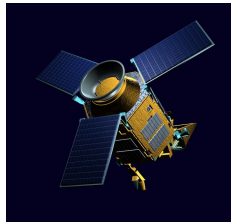
Drôn

(Scientific Aviation)



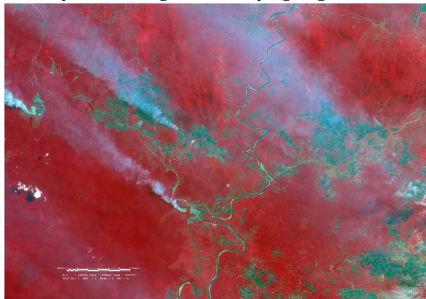
Lloeren

Roberts et al. [2022] (ESA Sentinel5P TROPOMI)



Llorfudiad-trylediad

Ffrydiau mwg o danau yng Nghanaada



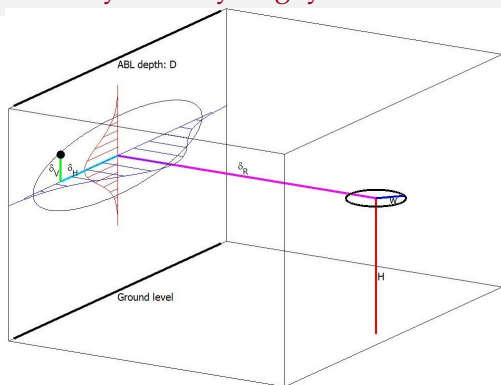
- Maes gwynt cryf homogenaidd
- Ffurf **Gaussaidd** i'r ffrwd
- Model **cyflwr sefydlog** yn addas

Ffrwd fwg o dân ger Rhuthun



- Gosteg / braidd dim gwynt
- Gwrthdro'n amgau'r ffrwd ym mhen uchaf yr **haenen ffin atmosfferig**

Model cyflwr sefydlog: y ffrwd Gaussaidd



- Coch: Uchder y ffynhonnell H
- Glas: Hanner-lled y ffynhonnell w
- Magenta: Dadleoliad dan y gwynt δ_R
- Cyan: Dadleoliad llorweddol δ_H
- Gwyrdd: Dadleoliad fertigol δ_V
- Uchder HFfA D
- Maint llorweddol $\sigma_H = \delta_R \tan(\gamma_H) + w$
- Maint fertigol $\sigma_V = \delta_R \tan(\gamma_V)$
- Onglau agor γ_H, γ_V
- Fector y gwynt \mathbf{U}

Matrics cyplysu (e.e. Stockie [2011])

$$a = \frac{1}{2\pi|\mathbf{U}|\sigma_H\sigma_V} \exp\left\{-\frac{\delta_H^2}{2\sigma_H^2}\right\} \times \left\{ \exp\left\{-\frac{\delta_V^2}{2\sigma_V^2}\right\} + \exp\left\{-\frac{(\delta_V+2H)^2}{2\sigma_V^2}\right\} \right. \\ \left. + \exp\left\{-\frac{(\delta_V-2(D-H))^2}{2\sigma_V^2}\right\} + \exp\left\{-\frac{(\delta_V+2D)^2}{2\sigma_V^2}\right\} \right\}$$

Model mwy cyffredinol: llorfudiad-trylediad

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{u} - D\nabla c) = s$$

ar gyfer crynodiad $c(\mathbf{x}, t)$, maes gwynt $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u, v, w)$ (sy'n hysbys), ffynonellau $s(\mathbf{x}, t)$, cysonyn trylediad D ac amod ffin $c(\mathbf{x}, 0) = c_0(\mathbf{x})$

Datrysiad rhifiadol cyfaint meidraidd (e.e. Eymard et al. [2000])

$$\text{Integreiddio: } \int_V \frac{\partial c}{\partial t} dV + \int_S (c\mathbf{u} - D\nabla c) \cdot \mathbf{n} dS = \int_V s dV$$

$$\text{Arwahanu: } \frac{V_{ijk}}{\Delta t} (c_{ijk}^{(n+1)} - c_{ijk}^{(n)}) + A_{ijk}(c^{(n)}) - D_{ijk}(c^{(n)}) = S_{ijk}^{(n)}, \text{ gyda } c_{ijk}^{(n)} = \frac{1}{V_{ijk}} \int_{V_{ijk}} c dV$$

$$A_{ijk}(c^{(n)}) = \Delta y \Delta z ((cu)_{i+1/2,j,k}^{(n)} - (cu)_{i-1/2,j,k}^{(n)}) + \dots, \quad D_{ijk}(c^{(n)}) = D \frac{\Delta y \Delta z}{\Delta x} (c_{i+1,j,k}^{(n)} - 2c_{i,j,k}^{(n)} + c_{i-1,j,k}^{(n)}) + \dots$$

- o Mae'r cyplysu rhwng ffynhonnell â grym s yn rhyw lleoliad, â'r arsylwad o bell o grynodiad c yn **llinol**. (Fel arall, gall y cyfrifiad gwrthdro fod yn gymhleth, cymherir â dulliau **atgyd**)

Yn ystadegol

Y model

$$c = As + b + \epsilon$$

- Fector c o arsylwadau crynodiad ar amseroedd a lleoliadau penodol
- Fector s **gwasgarog** o gyfraddau ffynhonnell sefydlog ar rhyw barth $\in \mathbb{R}^3$
- Matrics A yn cyplysu'r ffynonellau â'r arsylwadau
- Fector b o grynodiad cefndirol, **llyfn** mewn gofod ac amser
- Fector cyfeiliornad arsylwi Gaussiadd $\epsilon \sim N(\mathbf{0}, \lambda^{-2}I)$ â thrachywiredd λ^2

Amcan yr amcangyfrifiad

- Gyda'r fector c a'r matrics A yn hysbys, amcangyfrif lleoliadau, meintiau a chyfraddau'r ffynonellau s , y crynodiad cefndirol b a'r thrachywiredd λ^2

Yn y bôn

- Gwahanu ffynonellau sy'n creu garwedd gofodol, wrth grynodiad cefndirol llyfn

Crynodiad cefndirol

Priodweddau

- $b \geq 0$ ym mhobman
- b yn amrywio'n llyfn gydag amser a gofod
- Cynrychioliad yn nhermau ffwythiannau sail: $\mathbf{b} = \mathbf{P}\boldsymbol{\beta}$
- Cyplysiad gofodol penodol gyda chyfeiriad y gwynt

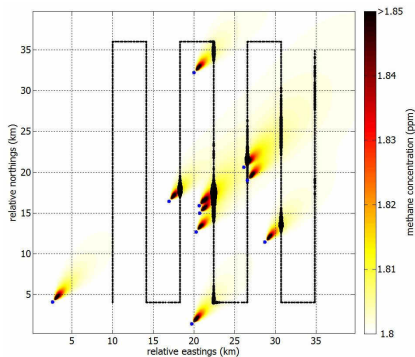
Hap-faes Gauss-Markov

$$f(\boldsymbol{\beta}) \propto \exp\left\{-\frac{\mu}{2}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0)^T \mathbf{J}_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0)\right\}$$

- $\mathbf{J}_{\boldsymbol{\beta}}$ yn wasgarog, $\mathbf{P} = \mathbf{I}$ yn y cymhwysiad presennol
- Yr hap-faes yn **rhag-fanyleb** mewn casgliad Bayesaidd
- Trachywiredd μ un rheoli llyfndra

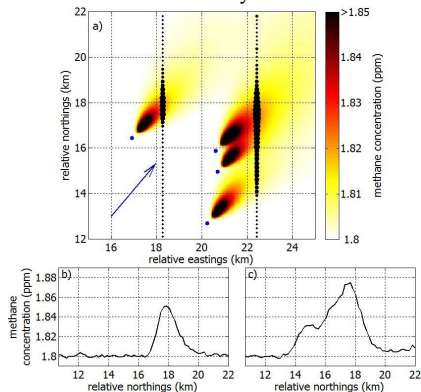
Efelychiad awyrol

Llwybr yr arsylwad



- Awyren yn dilyn y llwybr du
- Crynodiad mewn lliw

Wedi chwyddo



- Cyfeiriad y gwynt mewn glas
- Cyfres amser crynodiad (b, c)

Strategaeth y casgliad

Amcangyfrif Bayesaidd cychwynnol

- Ar gyfer s a b
- Lleoliadau posib y ffynonellau ar grid gosodedig
- Cyfrifiant cyflym

Casgliad Bayesiadd llawn

- Ar gyfer pob paramedr o ddiddordeb
- Amcangyfrif cyd-ôl-ddosbarthiad llawn
- Nifer, lleoliadau a grymoedd y ffynonellau i'w hamcangyfrif
- **Model cymysg** Gaussaidd
- Casgliad MCMC **naid-wrthdroadwy**

Amcangyfrif Bayesaidd cychwynnol

Rhag-fanyleb cefndirol

$$f(\boldsymbol{\beta}) \propto \exp\left\{-\frac{\mu}{2}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0)^T \mathbf{J}_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0)\right\}$$

Rhag-fanyleb grym ffynhonnell Laplace

$$f(\mathbf{s}) \propto \exp\{-\delta\|\mathbf{Q}\mathbf{s}\|_1\}$$

Tebygoliaeth Gaussaidd

$$f(\mathbf{y}|\mathbf{s}, \boldsymbol{\beta}) \propto \exp\left\{-\frac{\lambda^2}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{s} + \mathbf{P}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{y}\|^2\right\}$$

Cyd-ôl-ddwysedd

$$f(\mathbf{s}, \boldsymbol{\beta}|\mathbf{y}) \propto f(\mathbf{y}|\mathbf{s}, \boldsymbol{\beta})f(\mathbf{s})f(\boldsymbol{\beta})$$

Amcangyfrif ôl-uchafbwynt (*maximum a posteriori*)

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{s}, \boldsymbol{\beta}} \left\{ \frac{\lambda^2}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{s} + \mathbf{P}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{y}\|^2 + \frac{\mu}{2}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0)^T \mathbf{J}_{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_0) + \delta\|\mathbf{Q}\mathbf{s}\|_1 \right\}$$

Casgliad Bayesaidd llawn

Paramedrau

- Nifer y ffynonellau, â'u lleoliad, ehangder a chyfradd
- Paramedrau hap-faes cefndirol
- Trachywiredd y cyfeiliornad arsylwi
- Ac eraill, gan gynnwys e.e. cywiriad cyfeiriad gwynt
- Ysgrifennir y set yn fyr fel θ , a ellir ei rannu'n $\{\theta_{\kappa}, \theta_{\bar{\kappa}}\}$

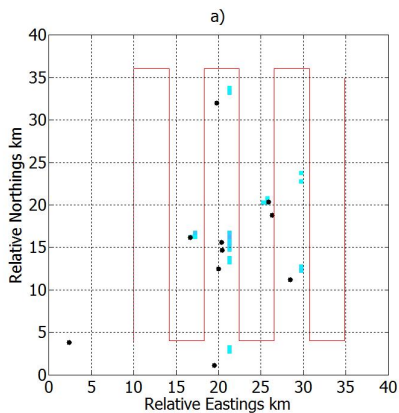
Dosraniad amodol llawn

$$f(\theta_{\kappa} | \mathbf{y}, \theta_{\bar{\kappa}}) \propto f(\mathbf{y} | \theta_{\kappa}, \theta_{\bar{\kappa}}) f(\theta_{\kappa} | \theta_{\bar{\kappa}})$$

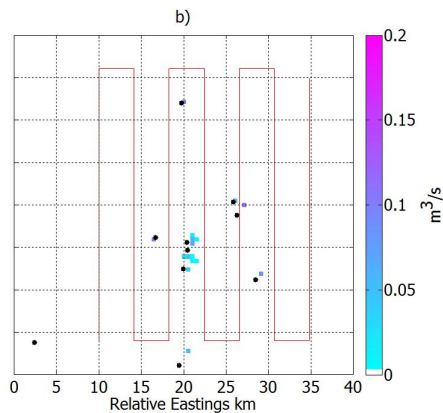
Dulliau samplu

- Gibbs o ddosraniadau amodol llawn
- Metropolis-Hastings o fewn Gibbs (mMALA lle'n bosib)
- MCMC **naid wrthdroadwy** (e.e. Jonathan [2021] yn y Gymraeg!)

Datrysiaid efelychiad awyrol

Amcangyfrif cychwynnol
(Ôl-uchafbwynt)

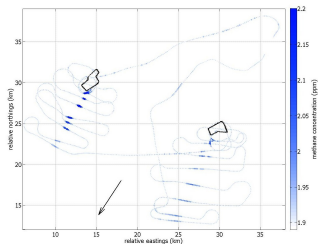
○ Gwirionedd = smotiau du

Amcangyfrif terfynol
(RJ-MCMC)

○ Amcangyfrif = lliw

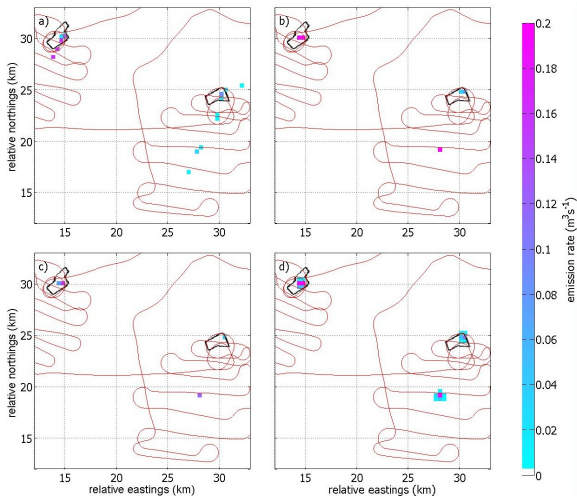
Arsylwadau a datrysiaid CH_4 safle tirlenwi

Arsylwadau



- Data o safle yng Nghanada
- Â diolch i Sander Geophysics
- Saeth ddu yw cyfeiriad y gwynt

Amcangyfrif

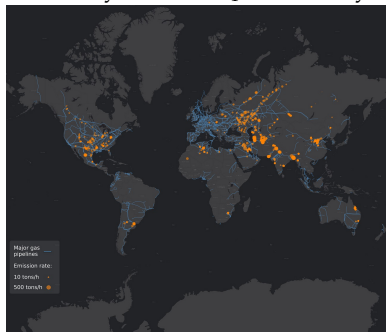


- (a) Cychwynnol, (b) Ôl-ganolrif
- (c) Ôl-gwantil 2.5%, (d) Ôl-gwantil 97.5%

Amcangyfrif [CH₄] o loeren

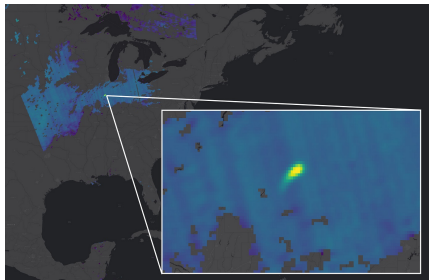
Yr uchelgais

Allyriadau CH₄ olew a nwy



- Glas : prif piblinellau
- Oren : allyriadau

Ffrwd CH₄ yn UDA



- Nodweddion ffrwd lled-Gaussaidd

<https://sentinel.esa.int/web/success-stories/-/copernicus-sentinel-5p-reveals-oil-and-gas-ultra-emitters>

Arslywadau TROPOMI

Ffynonellau data

- Cyhoeddus: ESA Sentinel 5P TROPOMI
- Preifat: arslwadau pwrpasol gan gwmnïau fel *www.ghgsat.com*

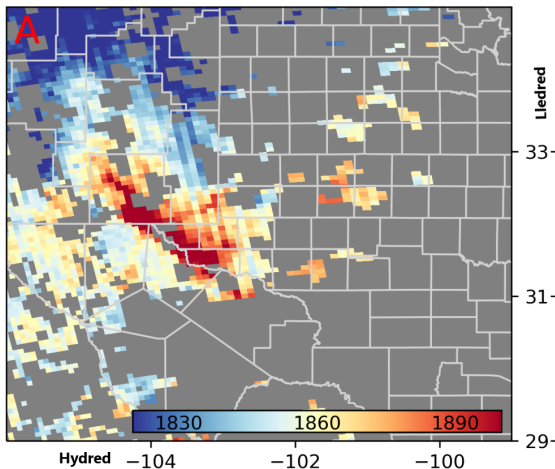
TROPOMI

- Arslwi dyddiol, byd-eang
- Mesuriad “uniongyrchol” o’r crynodiad colofn-integredig
- Cydraniad gofodol $\approx 5\text{km}$
- Ffynhonnell CH₄ lleiaf gellir ei chanfod $\approx 5\text{T/hr}$

Gwendidau

- Arslwi dros ddŵr
- Arslwi drwy gymylau
- Effeithiau albedo ac adlewyrchiad
- Sgil-ffeithiau **rhesu** (*striping*)

Cymhwysiad cymhellol : Permian Basin, UDA



Y basn

- Texas / New Mexico ($2 \times 10^5 \text{ km}^2$)
- Ardal o weithgaredd olew a nwy
- Allyriadau CH₄ blynyddol $\approx 3 \times 10^9 \text{ kg}$

Y ffigur

- Arsylw TROPOMI 31.01.2019
- Lliw : [CH₄] ppb
- Llwyd : dim data

Y sampl llawn

- Data dyddiol ar gyfer 2019
- ≈ 1000 pîscel

- Ffynonellau mawr o allyriadau tua $(H,L) = (-102, 32)$, ond nid oes arsylwadau o achos cymylau

Y syniad

Arsylwadau [NO₂] i wella amcangyfrif [CH₄]

- Prosesau anthropogenig yn tueddu cynhyrchu NO₂ a CH₄
⇒ [NO₂] a [CH₄] yn gyd-ddibynnol
- NO₂ yn haws i'w fesur na CH₄
⇒ Ceir darlun gofodol llawer llawnach ar gyfer NO₂
- Dyddiau yn unig yw oes NO₂
⇒ Haws nodweddi ffynhonnell

Felly

- Defnyddio [NO₂] fel newidyn benthyg lleol ar gyfer [CH₄]

Y model

Arsylw

$$N_{ij}^o = N_{ij} + \epsilon_{Nij}\sigma_{Nij}$$

$$C_{ij}^o = C_{ij} + \epsilon_{Cij}\sigma_{Cij}$$

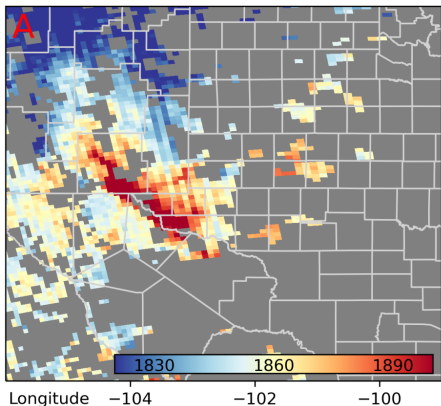
System

$$C_{ij} = \alpha_j + \beta_j N_{ij} + \epsilon_{Sij}\sigma_{Sj}$$

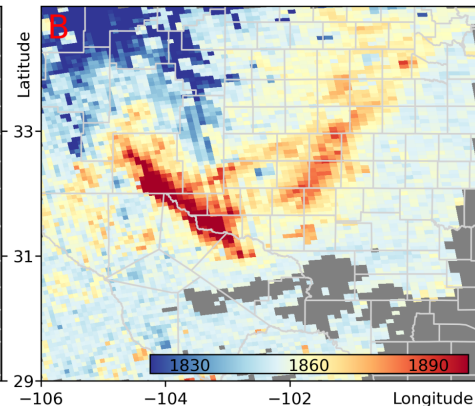
- Arslywadau N_{ij}^o ac C_{ij}^o o bicsel i ar ddiwrnod j
- Newidynnau system N_{ij} ac C_{ij} cyfatebol
- Cyfeiliornad mesur Gaussaidd, gyda gwyradau safonol i'w hancangyfrif
- Perthynas llinol rhwng y newidynnau system, a'r cyfeiliornad Gaussaidd yn ddibynnol ar y diwrnod yn unig, i'w amcangyfrif
- Casgliad Bayesaidd hwylus

Datrysiaid y cymhwysiad cymhellol

Arsylwadau “uniongyrchol”



Ôl-ganolrif o dan y model



- Llawer llai o lwyd ar y dde!
- O dan y model, mae amcangyfrif cyfanswm yr allyriadau dyddiol yn cynnyddu i ≈ 350% o'r amcangyfrif “uniongyrchol” am y flwyddyn 2019

Ar y gweill

Gwrthdroad

- Monitro amser-real o gyfres amser llinell golwg (e.e. anomaleddau)
- Gwrthdroi o gyfres amser llinell golwg (e.e. model gofod cyflwr)

[NO₂] fel newidyn benthyg

- Modelu effeithiau cydnewidynnau : tymor, lleoliad (lledred, orograffaeth, tymheredd cefndirol, gwledig-trefol)
- Cyfuno â model hylogiad

Cyffredinol

- Efelychu/brasamcanu **cyflym** o wasgariad graddfa fechan (e.e. o gylch adeiladau)
- **Cymathu** (*assimilate*) : cyfuno arsylwadau o synwryddion gwahanol (pwynt, llinell golwg a lloeren; hwyrach awyrol a drôn hefyd) mewn un casgliad
- **Graddnodi** synwryddion llai dibynadwy (ond rhad), ac arsylwadau lloeren
- **Dylunio** arosodiadau (*layouts*) monitro **optimaidd**

Llyfryddiaeth

- R. Eymard, T. Gallouet, a R. Herbin. Finite volume methods. *Handbook of Numerical Analysis*, 7:713–1018, 2000.
- B. Hirst, P. Jonathan, F. González del Cueto, D. Randell, a O. Kosut. Locating and quantifying gas emission sources using remotely obtained concentration data. *Atmospheric Environ.*, 74:141–158, 2013a.
- B. Hirst, P. Jonathan, a D. Randell. Blowin' in the wind. *Significance*, 10:17–19, 2013b.
- B. Hirst, D. Randell, M. Jones, P. Jonathan, B. King, a M. Dean. A new technique for monitoring the atmosphere above onshore carbon storage projects that can estimate the locations and mass emission rates of detected sources. *Energy Procedia*, 114: 3716–3728, 2017.
- B. Hirst, D. Randell, M. Jones, J. Chu, A. Kannath, N. Macleod, M. Dean, a D. Weidmann. Methane emissions: Remote mapping and source quantification using an open-path laser dispersion spectrometer. *Geophys. Res. Lett.*, 47:e2019GL086725, 2020.
- P. Jonathan. Cynrychioliad amharamedrig ar gyfer cyd-newidynnau aml-ddimensiynol mewn model gwerthoedd eithaf [A non-parametric representation for multidimensional covariates in an extreme value model]. *Gwerddon*, 33:68–84, 2021.
- M. J. Jones a P. Jonathan. Remote sensing for methane: monitoring and reducing greenhouse gas emissions, 2022. URL <https://medium.com/data-centric-engineering-blog/remote-sensing-for-methane-monitoring-and-reducing-greenhouse-gas-emissions-f37661685281>.
- C. N. Roberts, O. Shorttle, K. Mandel, M. J. Jones, R. Ijzermans, B. Hirst, a P. Jonathan. Enhanced monitoring of atmospheric methane from space over the Permian basin with hierarchical Bayesian inference. *Derbyniwyd gan Environ. Res. Lett.*, arXiv:2111.12486, 2022.
- J. M. Stockie. The mathematics of atmospheric dispersion modeling. *SIAM Rev.*, 53:349–372, 2011.

Diolch am wrando!