

Krystyna Pomorska\*, Aneta Duda\*

## MOŻLIWOŚCI ZASTOSOWANIA SYMULACJI KOMPUTEROWYCH W PROGNOZOWANIU ROZPRZESTRZENIANIA SIĘ ZANIECZYSZCZEŃ

Na stan czystości powietrza atmosferycznego w miastach wpływa emisja przemysłowa, ze środków transportu oraz emisja z palenisk domowych. Głównymi zanieczyszczeniami są powietrza atmosferycznego są; tlenki siarki, tlenki azotu, tlenki węgla, węglowodory oraz pyły zawierające metale toksyczne: ołów, cynk, arsen, selen, mangan i inne. Komunikacja w Polsce i w innych krajach na świecie odgrywa bardzo wielką rolę w życiu społecznym i gospodarczym. Rozwój każdego państwa jest ściśle związany z rozwojem transportu różnego typu. W warunkach miejskich stał się niezbędnym elementem życia człowieka i bez niego nie było by możliwe istnienie wielkich skupisk miejskich. Urządzenia transportowe oszczędzają czas przeznaczony na przemieszczanie ludzi i towarów. Również transport pozwala na rozgęszczenie dzielnic śródmiejskich i przenoszenie centrów miejskich na całe obszary miasta co wpływa na polepszenie warunków społecznych [1]. W Polsce od paru lat obserwuje się gwałtowny rozwój motoryzacji. Na naszych drogach pojawia się coraz większa ilość pojazdów, a ich liczba z roku na rok rośnie.

Przyjęte na całym świecie zasady ekopolityki wymagają dokładnego poznania ilości zanieczyszczeń pochodzących z emitorów oraz stopnia ich oddziaływania na jego poszczególne komponenty. Podstawą wszelkich działań jest ustalenie wielkości emisji lub imisji zanieczyszczeń powietrza odnoszących się zarówno do określonych punktów jak i powierzchni. W przypadku emisji istnieją znane metody pomiarowe i obliczeniowe pozwalające na ustalenie jej wielkości w jednostkach: [g/s], [kg/h], [Mg/miesiąc], [Mg/rok]. W przeciwieństwie do emisji, która w jednoznaczny sposób jest zdefiniowana jako ilość zanieczyszczeń przedostających się do atmosfery z określonego punktu lub powierzchni w danej jednostce czasu, imisja nie jest pojęciem ściśle zdefiniowanym. Powszechnie pojmowana imisja najogólniej oznacza stopień zanieczyszczenia określonego punktu w terenie pozostającego w zasięgu oddziaływania jednego względnie wielu źródeł emisji. Podstawą do analizy rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń są wyniki serii pomiarów imisji stężeń zanieczyszczeń powietrza. Najważniejszym problemem, który dotyczy komunikacji jest emisja spalin.

---

\* Krystyna POMORSKA, Aneta DUDA – Katedra Podstaw Techniki, Wydział Podstaw Techniki, Politechnika Lubelska.

Ze względu na niedoskonałość procesu spalania i właściwości spalanych paliw, podczas pracy silnika powstają substancje toksyczne, emitowane do środowiska wraz z gazami spalinowymi. Substancje te można podzielić na trzy grupy:

- produkty niezupełnego i niecałkowitego spalania (HC) i (CO),
- produkty utleniania azotu z powietrza ( $\text{NO}_x$ ),
- produkty spalania domieszek i zanieczyszczeń oraz pozostałe związki (Pb, S, sadza).

Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń w złożonych warunkach terenowych (warunki meteorologiczne i ukształtowanie terenu) bada się następującymi metodami:

- matematyczne modelowanie na drodze analitycznego lub numerycznego rozwiązywania ogólnego równania dyfuzji,
- modelowanie fizyczne w tunelach aerodynamicznych,
- bezpośrednie pomiary dyfuzji w terenie przy wykorzystaniu substancji znaczących [2].

Matematyczne systemy obliczeniowe metodami tradycyjnymi są dostępne w postaci programów komputerowych. Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń w powietrzu atmosferycznym wymaga zastosowania licznych zbiorów danych uwzględniających wielkości emisji z poszczególnych źródeł, charakterystyki techniczne emitorów, warunki meteorologiczne oraz ukształtowanie terenu. Stale jest także dyskutowana dokładność wyników uzyskanych przy pomocy modeli Gaussa, Eulera lub Langrange'a.

Modele rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w atmosferze są opracowywane w różnych krajach od ponad trzydziestu lat. Ważne jest, iż za pomocą modelowania matematycznego możliwa jest nie tylko ocena faktycznego stanu zanieczyszczenia, ale także daje możliwość prognozowania skutków mających wystąpić stężeń oraz prognozowania zagrożeń wywołanych dużymi emisjami losowymi.

Modelowanie może być także wykorzystywane przy doborze miejsca przyszłych źródeł emisji zanieczyszczeń w celu minimalizacji wpływu zanieczyszczeń na środowisko naturalne oraz w planowaniu zagospodarowania przestrzennego aglomeracji miejskiej [3]. Modele diagnostyczne stosuje się do oceny aktualnej jakości powietrza, a do prognozowania mających wystąpić stężeń imisyjnych wykorzystuje się modele prognostyczne, które znajdują zastosowanie przy tworzeniu systemów do przewidywania zagrożeń wywołanych dużymi emisjami losowymi np. wskutek awarii urządzeń [4].

Dotychczasowy sposób opisu rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w atmosferze wykorzystuje różniczkowe modele Eulera, całkowite przedstawienia Langrange'a oraz statystyczne modele Gaussa [5].

Najprostszym przypadkiem takiego modelu są równania Eulera, opisujące dynamikę pojedynczego płynu idealnego. W literaturze istnieje duża liczba modeli wykorzystujących równanie Eulera do obliczania stężeń, depozycji, transportu związków siarki i azotu oraz przewidywania wystąpienia warunków smogu fotochemicznego.

Równania Eulera stanowią prawo zachowania masy, momentu pędu i energii. Punktem wyjścia w ujęciu Eulera jest równanie dyfuzji molekularnej w postaci:

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial t} + \tilde{u} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial x} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial y} + \tilde{w} \frac{\partial \tilde{S}}{\partial z} = D \left( \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial z^2} \right) + I$$

gdzie:  $S$  – stężenie zanieczyszczenia w punkcie o współrzędnych  $(x,y,z)$ ;

$U$  – wektor wiatru o składowych  $u,v,w$ ;

$D$  – współczynnik dyfuzji monekularnej;

$I$  – funkcja wyrażająca działania objętościowego źródła emisji.

Systemy wykorzystujące modele Gaussa różnią się przede wszystkim metodami wyliczania współczynników transportu  $\delta_y$ ,  $\delta_z$  oraz zostały wyprowadzone z równań dyfuzji [6]. Różnica między nimi polega głównie na przyjmowaniu przez różnych autorów odmiennych założeń upraszczających, inaczej formułowanych warunków granicznych oraz różnego zakresu zastosowań praktycznych.

W zależności od sposobu ich wyznaczania lub parametryzowania wyróżnia się trzy główne podgrupy modeli, które zostały zaadoptowane do wykorzystania ich w warunkach złożonych:

1. Modele smugowe Gaussa „starej generacji” bazujące na tradycyjnej klasyfikacji stanów równowagi atmosfery wg Pasquille’a-Gifforga-Turnera (P-G-T).
2. Modele „nowej generacji” z submodelem Gaussa bazującym na parametrach skalujących warstwę graniczną.
3. Modele Gaussa smugi segmentowej i/lub obłoku przystosowane do opisu rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w warunkach niestacjonarnych i niejednorodnych [2].

Rozwiązanie równania Eulera za pomocą metod numerycznych i uwzględnienie pola stężeń ustalonego w czasie, poziomego ruchu powietrza, braku objętościowych źródeł emisji, strumienia adwekcyjnego zanieczyszczeń prowadzi do równania przedstawianego w literaturze polskiej jako wzór Pasquille’a [7]:

$$S_{xyz} = \frac{E_g}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{2\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\}$$

gdzie:  $S(x,y,z)$  – stężenie zanieczyszczeń w punkcie  $(x,y,z)$ ,

$E$  – natężenie emisji zanieczyszczeń ze źródła,

$\bar{u}$  – średnia prędkość wiatru,

$\delta_y, \delta_z$  – współczynniki dyfuzji atmosferycznej pionowej i poziomej,

$H$  – efektywna wysokość emisji.

Równanie to, opisuje ono rozkład stężeń zanieczyszczenia z punkтового źródła emisji przy następujących warunkach:

1. Pola meteorologiczne są stacjonarne i jednorodnie przestrzenne.
2. Brak jest górnej warstwy inwersji, która ograniczałaby rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń w pionie.

3. Prędkość wiatru jest większa od ustalonej prędkości minimalnej.
4. Nie uwzględnia się procesów zaniku i transformacji zanieczyszczeń.
5. Emisja ze źródła jest ciągła i stała w czasie.
6. Pomija się dyfuzję turbulencyjną wzdłuż kierunku wiatru.
7. Zanieczyszczenia są odbijane od powierzchni podłoża.
8. Teren, nad którym rozprzestrzenia się smuga jest płaski.

## **MODEL TRÓJWYMIAROWY OPARTY NA METODZIE ELEMENTÓW SKOŃCZONYCH**

Rozwiązanie równania dyfuzji metodą elementów skończonych w przestrzeni trójwymiarowej polega na podzieleniu rozpatrywanego obszaru na elementy ośmiowęzłowe, opisane liniowymi funkcjami kształtu. Wartości poszukiwanej funkcji w węzłach siatki stanowią układ niewiadomych [8]. Metoda ta, daje możliwość uwzględnienia zarówno zmian pola prędkości wiatru, jak również wystąpienia przeszkód terenowych. Obecność przeszkody jak i konwekcja w kierunku Y zmienia w sposób istotny pole stężenia zanieczyszczeń w analizowanym obszarze [9].

## **MODEL SKRZYNKOWY (BOX-MODELE)**

Modele skrzynkowe są jednymi z najprostszych, tzw. „0-wymiarowych” znajdujących swoje zastosowanie nie tylko w teoretycznych pracach studialnych, nakierowanych na konstruowanie mechanizmów fotochemicznych, ale również posiadają funkcję aplikacyjną predysponującą je do np. szacowania poziomu emisji zanieczyszczeń wtórnych w rzeczywistej atmosferze. W modelu tym, obszar obliczeniowy zdefiniowany jest jako przestrzeń wyznaczoną przez stałą powierzchnię oraz zmienną wysokość. W takim układzie obliczeniowym uwzględniane są następujące procesy:

- emisja zanieczyszczeń
- napływ zanieczyszczeń do obszaru obliczeniowego
- zmiana głębokości warstwy mieszania
- depozycja zanieczyszczeń
- przemiany chemiczne zanieczyszczeń.

Model ten funkcjonuje przy następujących założeniach upraszczających:

- cała analizowana masa powietrza jest jednorodna pod względem składu chemicznego, temperatury oraz wilgotności,
- dyfuzja zanieczyszczeń przez ściany boczne „skrzynki” jest znikomo mała,
- górna powierzchnia „skrzynki” odwzorowuje górną granicę warstwy mieszania [10].

## SIECI NEURONOWE (NEURAL NETWORKS)

W literaturze można spotkać się z wieloma pracami dotyczącymi sieci neuronowych, które są zaawansowanym modelowaniem procesów zachodzących w powietrzu atmosferycznym.

Dynamikę migracji zanieczyszczeń powietrza atmosferycznego można ocenić badając zależność stężeń imisyjnych w czasie. Serie pomiarowe stężeń traktuje się jako szeregi czasowe. Sieci neuronowe pozwalają powiązać szeregi czasowe zmiennych określonych, a także wyznaczyć ich korelację ze zmiennymi określającymi. Największe zainteresowanie wzbudzają wielowarstwowe sieci neuronowe o neuronach typu sigmoidalnego oraz sieci radialne [11].

Rozpatrując dynamikę rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń powietrza atmosferycznego jako analizę systemu z szybko zmieniającymi się w czasie stężeniami zanieczyszczeń w zależności od: warunków meteorologicznych (kierunek i prędkość wiatru, temperatura, wilgotność powietrza, ciśnienie atmosferyczne), możemy stwierdzić, że podstawą analizy są szeregi czasowe obu rodzajów zmiennych. Zmienne te, wyznacza się empirycznie na stacji monitoringu powietrza atmosferycznego. W przypadku konieczności rozszerzenia zbiorów danych poprzez interpolację, stosuje się sieci z rozszerzonymi funkcjami (Function Link Net) np. sieci Pao [11] oraz sieci sigma-pi [12].

Pierwszy etap obliczeń polega na wytworzeniu odpowiedniej sieci dla danego zbioru danych, następnie przeprowadza się jej nauczanie. W zbiorze danych wejściowych rozróżnia się dwa zbiory: uczący  $T_r$ , z którego wydzielony jest zbiór testujący  $T_e$ . Miarą zdolności zapamiętywania danych jest odwzorowanie zbioru  $T_r$  przez sieć. Zdolność uogólniania określają wyniki otrzymane dla zbioru  $T_e$ .

Miernikami jakości sieci, a tym samym modelu są: Data Mean – wartość średnia zmiennej opisywanej, Data S.D. – odchylenie standardowe, Terror Mean – przeciętna wartość błędu, Abs.E. Mean – wartość średnia z modułów błędu. Terror S.D. – odchylenie standardowe błędów, S.D. Ratio – miernik wyznaczony jako Terror S.D./Data S.D., Correlation – współczynnik korelacji Pearsona. Całkowitą jakość sieci określają mierniki niezależne dla każdego zbioru [13].

Różnicą oddzielającą sieci neuronowe (neural networks) od pozostałych systemów obliczeń rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń jest fakt, że sieci neuronowe rozróżniają własności regionów na których zostały zastosowane. W modelach Gaussa, Eulera lub Langrange'a parametr ten praktycznie nie występuje, gdyż dla całego kraju występuje ta sama zasada wyznaczania współczynników modeli transportu zanieczyszczeń powietrza atmosferycznego.

Omówione modele matematyczne wykorzystują takie elementy składowe jak: stężenie, prędkość wiatru, współczynnik dyfuzji, działanie źródła emisji. Natomiast sieci neuronowe dodatkowo uwzględniają współrzędne wyznaczające położenie stacji pomiarowej oraz właściwości rejonów otaczające punkty pomiarowe.

## LITERATURA

1. Stawiński R.: Transport a człowiek i ochrona środowiska, Przegląd komunikacyjny nr 9, 10, 1991.
2. Zwoździak J.: metody prognozy i analizy stężeń zanieczyszczeń w powietrzu w regionie Czarnego Trójkąta, Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 1995.
3. Michalczyk J.K., Murawski K., Pawłowski L.: Propozycje symulacji numerycznych rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w powietrzu atmosferycznym, Ochrona powietrza i problemy odpadów. Nr 2, 50–53, 1999.
4. Szepesi O.J.: Compendium of regulatory air quality simulation models, Akad. Kiado, Budapest 1989.
5. Zanetti P.: Air pollution modeling. Theories computational method and available software, Van Norstad Renhold, New York 1990.
6. Straszko J., Paulo L.A.: Modele dyfuzyjne propagacji zanieczyszczeń w atmosferze, Inżynieria Chemiczna i Procesowa, nr 17/1996.
7. Juda J., Chróściel S.: Ochrona powietrza atmosferycznego, WNT Warszawa, 1974.
8. Zientkiewicz O.C.: The Finite Element Method, Mc Graw Hill, London 1977.
9. Zlatev Z., Berkowicz R., Prahm L.: Three- dimensional advection diffusion modeling for regional scale, Atmos. Environ. Vol 17, 3, 491–499, 1983.
10. Bogacki M., Mazur M., Oleniacz R.: Modelowanie stężenia ozonu w niskiej troposferze na przykładzie Nowego Sącza, Aura, 3, 4–6, 1999.
11. Pao Y.H.: Adaptive Paltern Recognition and Neural Networks, Addison Weseley Reading, 1989.
12. Rumelhar D.E., Hinton G.E., Williams R.J.: Learning internal representations by error propagation. In Parrallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of cognition, Eds. E.D.E. Rumelhord I.L.Mc Clelland vol II, Mit. Press Cambridge, 1986.
13. Osowski S.: Sieci neuronowe w ujęciu algorytmicznym. WNT, Warszawa 1996.

## Streszczenie

Na stan czystości powietrza atmosferycznego w miastach wpływa emisja przemysłowa, ze środków transportu oraz emisja z palenisk domowych. Głównymi zanieczyszczeniami do powietrza atmosferycznego są: tlenki siarki, tlenki azotu, tlenki węgla, węglowodory oraz pyły zawierające metale toksyczne: ołów, cynk, arsen, selen, mangan i inne.

Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń bada się w złożonych warunkach terenowych złożonymi metodami:

- matematyczne modelowanie na drodze analitycznego lub numerycznego rozwiązywania ogólnego równania dyfuzji,
- modelowanie fizyczne w tunelach aerodynamicznych,
- bezpośrednie pomiary dyfuzji w terenie przy wykorzystaniu substancji znaczących.

Za pomocą modelowania matematycznego możliwa jest nie tylko ocena faktycznego stanu zanieczyszczenia, ale także możliwość prognozowania skutków mających wystąpić stężeń oraz prognozowania zagrożeń wywołanych dużymi emisjami losowymi.

W literaturze prezentowane są zestawienia i podziały modeli rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w powietrzu atmosferycznym. Podstawowymi modelami opisu rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń są różniczkowe modele Eulera, całkowite Langrange'a oraz statystyczne modele Gaussa. Z innych modeli należy wymienić model trójwymiarowy oparty na metodzie elementów skończonych. Model ten należy do grupy numerycznych modeli dyfuzyjnych. Zaawansowaną techniką modelowania procesów rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń są sieci neuronowe. Zastosowanie sieci neuronowych oparte jest na licznych zbiorach danych. Podstawową cechą sieci neuronowych jest jej zdolność do uogólnienia, którą uzyskuje się podczas nauczania na podstawie zbioru danych.

W prezentacji przedstawiono krótkie omówienie wybranych modeli.

## **THE CAPABILITIES OF EMPLOYING COMPUTER SIMULATIONS IN FORECASTING THE SPREADING OF POLLUTION**

### **Summary**

The state of the air in city areas is influenced by industrial emission, transport and home fuel consumption (eg. fireplaces, coal heating systems)

The main air pollutants are: lead, zinc, arson, selen, mangan and others.

The spread of pollution is measured in composite local conditions using compound methods such as:

- mathematical simulation by way of analytical or numeric solving of the general equation of diffusion,
- physical simulation – in wind tunnels,
- direct measurements of diffusion in the field, utilizing marked substances.

The use of mathematical simulation allows not only for the measurement of the actual level of pollution, but also gives the ability to forecast it's effects as well as asses the threat caused by large random emissions.

Literature presents composition and division of models of diffusing pollution in the atmosphere. The basic models describing the diffusion of pollutants are the differential Euler model, Langrange integrated model as well as Gauss statistical model.

Other models which should be mentioned are the three dimensional model based on the method finished elements. This model belongs to the group of numeric diffusion models.

An advanced technique of modeling the processes of pollutant diffusion are neuron networks. The employment of neural networks is based on numerous data sets. The basic feature of neural networks is their ability to generalize, which is achieved during computer managed on the basis of the data set.

A short discussion of the chosen models is presented in the presentation.