

ZAŁĄCZNIK NR 3

**RAPORT (QA/QC) Z OCENY JAKOŚCI OBLICZEŃ
ROZPRZESTRZENIANIA SIĘ ZANIECZYSZCZEŃ ZA ROK 2017**

Ocena jakości wyników modelowania – raport QA/QC

Oszacowanie wysokości stężeń substancji zanieczyszczających w powietrzu na podstawie obliczeń z wykorzystaniem numerycznego modelu jakości powietrza można uznać za prawidłowe, w przypadku kiedy obliczenia dla rzeczywistej sytuacji wykorzystującej emisje aktualne dla terminu obliczeń wskazują na dobrą zgodność wyników modelowania z obserwacjami ze stanowisk pomiarowych. Do oceny sprawdzalności obliczeń modelowych w ramach oceny jakości powietrza zostały wykorzystane wyniki pomiarów stężeń substancji na stacjach Państwowego Monitoringu Środowiska. Aby warunek reprezentatywności był spełniony wzięte zostały pod uwagę ciągi pomiarowe, w których zachowane zostały warunki wskazane w rozporządzeniu Ministra Środowiska z dnia 13 września 2012 r. w sprawie dokonywania oceny poziomów substancji w powietrzu.

Tabela 1. Wymagania, jakie powinny spełniać wyniki pomiarów ciągłych

Wymagania	Dwutlenek siarki, dwutlenek azotu, tlenki azotu i tlenek węgla	Zanieczyszczenia pyłowe i ołów	Ozon, dwutlenek azotu i tlenek azotu	Benzo(a)piren
Niepewność	15%	25%	15%	50%
Minimalny procent ważnych danych	90%	90%	90% w lecie 75% w zimie	90%
Minimalne pokrycie czasu				33%

Niepewność pomiaru definiowana jest w normie PN-ISO 5725:2002 Dokładność (poprawność i precyzja) metod pomiarowych i wyników pomiarów, a także w przewodniku pt. "Wyrażanie niepewności pomiaru" (Główny Urząd Miar, 1999).

Tabela 2. Wymagania, jakie powinny spełniać wyniki pomiarów okresowych

Wymagania	Dwutlenek siarki, dwutlenek azotu, tlenki azotu i tlenek węgla	Zanieczyszczenia pyłowe i ołów	Ozon, dwutlenek azotu i tlenek azotu	Benzo(a)piren
Niepewność	25%	50%	30%	50%
Minimalny procent ważnych danych	90%	90%	90%	90%
Minimalne pokrycie czasu	14%	14%	>10% w lecie	14%

W celu weryfikacji wyników modelowania pod kątem zgodności z wynikami pomiarów, przy przygotowywaniu danych wejściowych do modelowania na poziomie województw, zdefiniowane zostały receptory dyskretne o położeniu zgodnym z lokalizacjami wszystkich stacji funkcjonujących w Państwowym Monitoringu Środowiska dla wszystkich obszarów stref. Otrzymane w tych punktach wyniki z modelu umożliwiły porównanie wyników modelowania z wynikami pomiarów stężeń badanych substancji. Dla każdej analizowanej substancji obliczone zostały odpowiednie średnie stężenia modelowane i średnie stężenia zmierzone.

Okresy uśredniania użyte do określenia niepewności modelowania wynikają z rozporządzenia Ministra Środowiska z dnia 13 września 2012 r. w sprawie dokonywania oceny poziomów substancji w powietrzu. Zgodnie z dyrektywą 2008/50/WE niepewność modelowania jest

definiowana jako maksymalne odchylenie między zmierzonym, a obliczonym poziomem stężenia dla 90% punktów monitoringu w danym okresie, dla wartości dopuszczalnej, z pominięciem sytuacji szczególnych. Niepewność modelowania interpretuje się jako mającą zastosowanie w zakresie stężeń zbliżonych do odpowiedniej wartości dopuszczalnej (lub wartości docelowej). Pomiary stałe, które należy wybrać dla porównania z wynikami modelowania, muszą być reprezentatywne dla skali objętej modelem.

Tabela 3. Wymagania, jakie powinny spełniać wyniki modelowania w zakresie PM₁₀, PM_{2,5}, SO₂, NO₂, B(a)P

Wymagania	Dwutlenek siarki, dwutlenek azotu i tlenki azotu	Zanieczyszczenia pyłowe i ołów	Benzo(a)piren
stężenie średnie jednogodzinne	50%		
stężenie średnie ośmiogodzinne	50%		
stężenie średnie dobowe	50%		
stężenie średnie roczne	30%	50%	60%

Tabela 4. Wymagania, jakie powinny spełniać wyniki pomiarów w zakresie PM₁₀, PM_{2,5}, SO₂, NO₂, B(a)P

Wymagania	Dwutlenek siarki, dwutlenek azotu i tlenki azotu	Zanieczyszczenia pyłowe i ołów	Benzo(a)piren
Pomiary stałe Niepewność pomiaru	15%	25%	50%
Minimalny uzysk danych	90%	90%	90%
Minimalne pokrycie czasowe: — tło miejskie i oddziaływanie ruchu drogowego	-	35%	-
oddziaływanie przemysłu	-	90%	-

Zakres analizy niepewności dokonywanej w ramach oceny jakości powietrza dla każdego roku obejmuje obliczenie podstawowych statystyk błędów: błędu względnego oraz współczynnika korelacji dla każdej stacji dla ciągu całorocznego w odniesieniu do stężeń analizowanych zanieczyszczeń dla reprezentatywnych stacji monitoringu jakości powietrza.

Współczynnik korelacji jest miarą zgodności czasowej zmienności wartości modelowanych i obserwacji pomiarowych i został obliczony dla wartości stężeń 24-godzinnych oraz 1-godzinnych.

W ramach dodatkowych parametrów opisujących weryfikację wyników modelowania zastosowane zostały wskaźniki zaproponowane w pracy „*The application of models under the European Union's Air Quality Directive: A technical reference guide*” z 2011 r. Jednym z proponowanych wskaźników ewaluacji modeli jest RDE – błąd względny dyrektywy (*Relative Directive Error*) określający rozbieżność pomiędzy wartością pomiaru najbardziej zbliżoną do wartości dopuszczalnej oraz odpowiadającej jej posortowanej wartości z modelu. Wartość ta definiowana jest wzorem:

$$RDE = \frac{|X_p - X_m|}{X_d}$$

gdzie:

X_p - wartość pomiarowa,

X_m - wartość z modelu,

X_d – wartość dopuszczalna.

Wartości tego wskaźnika odnoszą się zarówno do wartości stężeń rocznych, jak i godzinnych czy dobowych, w zależności od wartości dopuszczalnych.

Dodatkowo został określony błąd względny Bw będący miarą niepewności modelowania wyrażony według wzoru:

$$Bw = \frac{Xp - Xm}{Xp}$$

Błąd względny jest również obliczany dla wartości percentyla i określany jest jako RPE – Relative Percentile Error. Wskaźnik tego błędu odnosi się do dopuszczalnej ilości przekroczeń wartości dopuszczalnej i wyrażony jest według wzoru:

$$RPE = \frac{Op - Mp}{Op}$$

gdzie:

Op – wartość percentyla wynikająca z pomiarów,

Mp – wartość percentyla wynikająca z modelowania.

Wskaźniki te zostały obliczone dla stanowisk pomiarowych stanowiących podstawę do weryfikacji wyników modelowania.

Ocena sprawdzalności modelu w ramach DELTA TOOL

Poza klasycznymi wskaźnikami, ocena jakości modelowania została również przeprowadzona z wykorzystaniem najnowszej edycji programu do ewaluacji modeli – DELTA Tool v5.5. Narzędzie DELTA przeprowadza analizę w oparciu o dwa zbiory danych tj. wyniki z modelowania oraz dane z obserwacji. Danymi wejściowymi były serie czasowe wartości stężeń z punktów siatki modelu CALPUFF, przy czym lokalizacja tych punktów odpowiadała lokalizacji stacji pomiarowych. Teoretycznie program działa niezależnie od rozmiaru domeny obliczeniowej i rozdzielczości przestrzennej przyjętej w modelowaniu. Niemniej jednak niezbędne do przeprowadzenia prawidłowej oceny wyników modelowania była konieczność opracowania takiej metodyki modelowania, która pozwala na wyznaczenie uśrednionych wyników dla komórek siatki odpowiadających lokalizacji stacji pomiarowych.

Narzędzie DELTA wyznacza statystyki dla danej stacji tylko w przypadku, gdy wzajemne pokrycie danych model – obserwacja wynosi co najmniej 75% dla rozpatrywanego okresu. Analizy przeprowadzane dla okresów uśrednienia (np. średnie dobowe) również wymagają kompletności danych na poziomie 75%. Zasadniczo narzędzie DELTA przeznaczone jest do oceny wyników modelowania, jednakże uwzględniono również możliwość przeprowadzenia analizy porównawczej wyników z różnych modeli.

Narzędzie DELTA umożliwia przeprowadzenie wielu analiz, w tym: czasowych, przestrzennych i wielowymiarowych.

- a) Analizy czasowe mogą być wykonywane dla różnych okresów uśrednienia (średnie dla całego okresu obliczeniowego, dobowe wartości minimalne, maksymalne, średnie dla pór roku, dni tygodnia z uwzględnieniem weekendów lub niezależnie dla pory dnia).
- b) Analizy przestrzenne mogą być realizowane na dwa sposoby:
 - pośrednio: w oparciu o klasyfikację stacji monitoringu,
 - bezpośrednio: wykorzystując funkcjonalność narzędzia Google Earth, które pozwala na wizualizację parametrów statystycznych dla każdej stacji niezależnie (jako punkty na mapie dwuwymiarowej).

- c) Analizy wielowymiarowe, w których zestawia się jeden lub wiele elementów z każdego zbioru wymiarów na jednym wykresie (wymiarzy odnoszą się do wybranych parametrów, modeli, scenariuszy lub stacji monitoringu).

Ponadto tryb analizy porównawczej pozwala na tworzenie raportów zbiorczych, zawierających kryteria jakości dla różnych wskaźników statystycznych odnoszących się do danego zastosowania modelu w ramach dyrektywy.

Ocena jakości modelowania w narzędziu DELTA przeprowadzana jest w oparciu o zestaw wskaźników oraz zdefiniowane kryteria. Jednym z zaproponowanych kryteriów jest MPC (*Model Performance Criteria*), który określa minimalne wymagania, jakie powinno spełniać modelowanie. Dodatkowo wprowadzono wskaźnik MQO (*Model Quality Objective*), który jednoznacznie wskazuje czy wybrany model jest właściwy dla danego zastosowania.

$$MQO = \frac{RMSE}{2RMS_U} = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - M_i)^2}}{2RMS_U} \leq 1$$

Dla średnich rocznych wartości stężeń współczynnik MQO określany jest przez formułę:

$$MQO = \frac{|BIAS|}{2U(\bar{O})} \leq 1$$

gdzie:

$U(O_i)$ - niepewność pomiaru,

O_i - stężenie zmierzone na stacji,

M_i - stężenie wyznaczone przez model.

Na potrzeby oceny jakości modelowania, przyjmuje się następujące przedziały dla współczynnika MQO:

- $MQO \leq 0,5$ – wyniki modelowania zawierają się w przedziale określającym niepewność pomiaru, wprowadzanie zmian w modelu nie przyniesie poprawy wyników
- $0,5 < MQO \leq 1$ – model spełnia założone wymagania, wprowadzenie zmian może poprawić uzyskiwane wyniki
- $MQO > 1$ – w tym przypadku różnice pomiędzy pomiarami a wartościami uzyskanymi z modelu są znaczące, model nie spełnia wymagań i należy przeprowadzić walidację.

Poniżej zamieszczono główne statystyki związane z MQO:

błąd średni (*an. Mean Bias*)

$$MB = \bar{M} - \bar{O}$$

błąd średniokwadratowy (*ang. Root Mean Square Error*)

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2}$$

Znormalizowane średnie odchylenie standardowe (*ang. Normalised Mean Standard Deviation*)

$$NMSD = \frac{(\sigma_M - \sigma_O)}{\sigma_O}$$

scentrowany błąd średniokwadratowy (*ang. Centred Root Mean Square Error*)

$$CRSME = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [(M_i - \bar{M}) - (O_i - \bar{O})]^2}$$

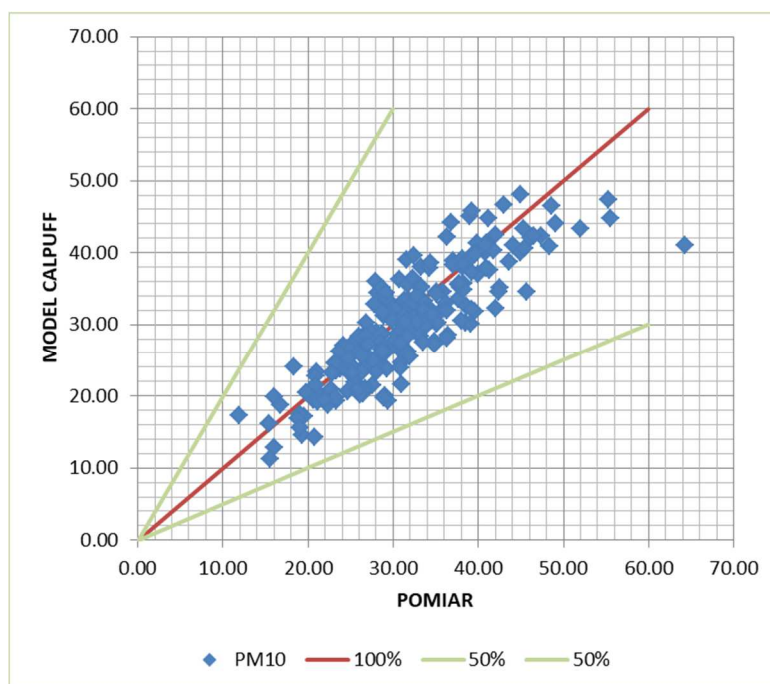
współczynnik korelacji (*ang. Correlation Coefficient*)

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M}) (O_i - \bar{O})}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M})^2} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}}$$

Narzędzie DELTA pozwala na tworzenie raportów dla średnich rocznych i szeregów godzinowych wyników modelowania. W niniejszej pracy została przedstawiona analiza oparta na błędzie MQO tylko dla wartości godzinowych. Analizę wyników modelowania w narzędziu DELTA Tool przeprowadzono na danych surowych przed integracją wyników z pomiarami.

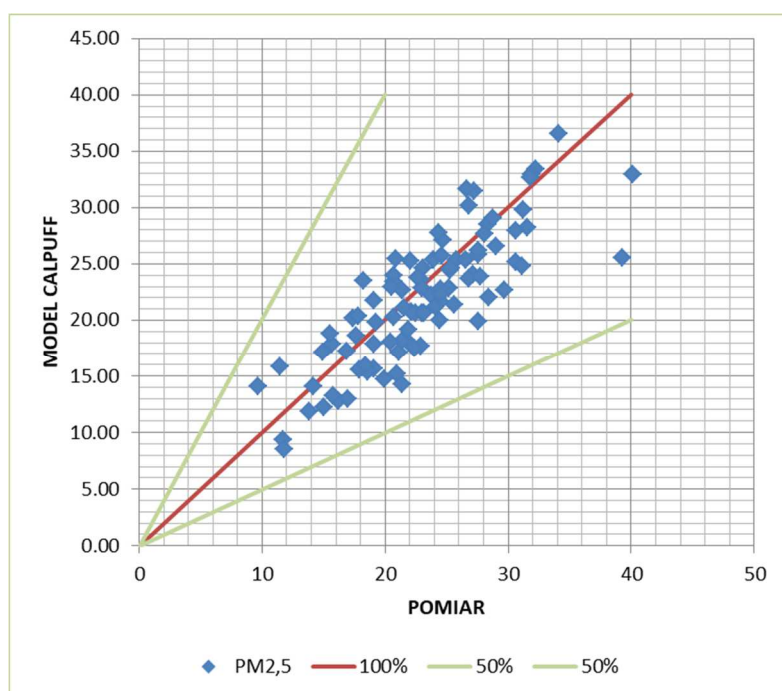
Wyniki modelowania dla wszystkich analizowanych stacji pomiarowych wykazują bardzo dobrą zbieżność nie przekraczającą błędu powyżej 50% w przypadku pyłu PM10 i PM2,5, SO₂ (*Rysunek 1, Rysunek 2, Rysunek 4*), 30% w przypadku NO₂ (*Rysunek 3*), 60% dla BaP (*Rysunek 5*).

Rysunek 1. Wykres rozproszenia średnich rocznych stężeń pyłu zawieszonego PM10 (źródło: wyniki modelowania CALPUFF i pomiary PMS, GIOŚ)

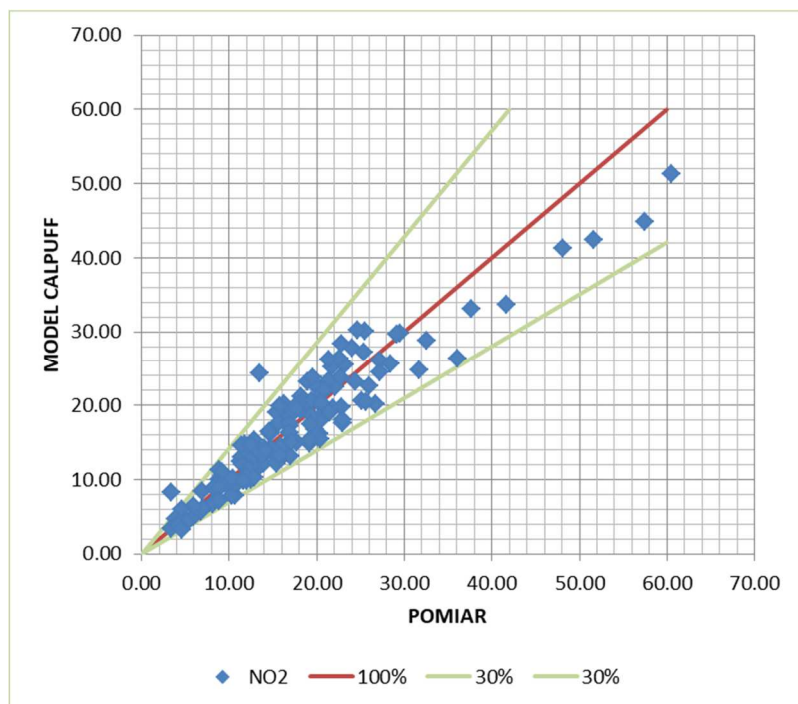


Przeprowadzono również analizę w ramach DELTA TOOL dla wszystkim analizowanych zanieczyszczeń, która wskazuje na spełnienie warunku zgodności wyników modelowania i wyników pomiarów w analizowanym okresie czasu. Wskaźnik MQI określany jako Model Quality Indicator definiuje się jako stosunek pomiędzy odchyleniem zmierzonym do modelu, a ilością proporcjonalną do niepewności pomiaru. Wskaźnik MQO jest spełniony gdy MQI jest mniejsze lub równe 1.

Rysunek 2. Wykres rozproszenia średnich rocznych stężeń pyłu zawieszonego PM_{2,5} (źródło: wyniki modelowania CALPUFF i pomiary PMS, GIOŚ)

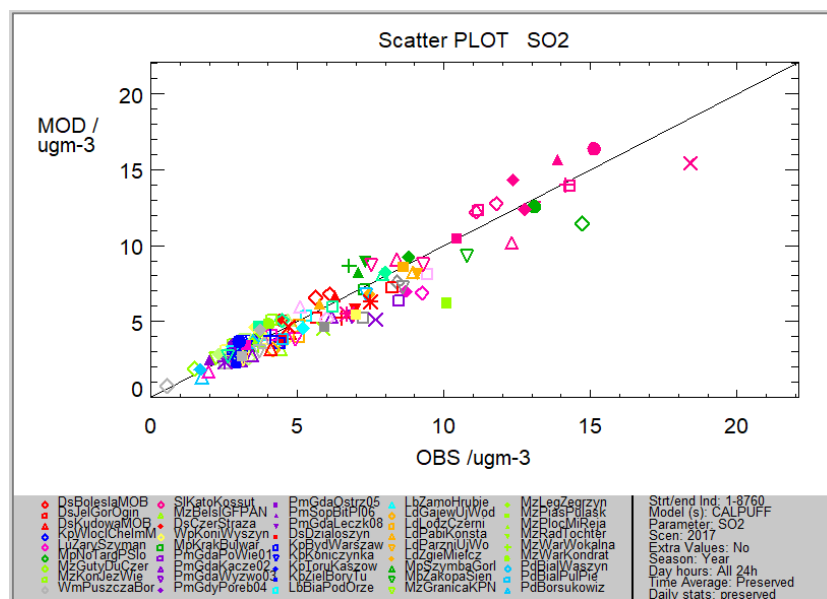


Rysunek 3. Wykres rozproszenia średnich rocznych stężeń NO₂ (źródło: wyniki modelowania CALPUFF i pomiary PMS, GIOŚ)



Analiza zbieżności wyników modelowania oraz wyników pomiarów została wykonana w zakresie stężeń średniorocznych dla dwutlenku siarki. W ramach analizy w Delta Tool wykonano rozrzut wartości średniorocznych SO_2 z modelu z wartościami z pomiarów.

Rysunek 4. Wykres rozproszenia średnich rocznych stężeń SO_2 (źródło: Delta Tool, GIOŚ)



Rysunek 5. Wykres rozproszenia średnich rocznych stężeń BaP (źródło: wyniki modelowania CALPUFF i pomiary PMŚ, GIOŚ)

