

Příloha 2/A

Receptorové modelování – model Chemical Mass Balance 8.2

1. CMB 8.2

Model Chemical Mass Balance (dále jen CMB) je jedním z matematických modelů sloužících k receptorovému modelování. CMB lze stáhnout s poměrně rozsáhlou průvodní dokumentací a příkladovými vstupními daty na internetových stránkách U.S. Environmental Protection Agency (www.epa.gov). Receptorové modelování používá fyzikální a chemické charakteristiky plynů a tuhých částic změřené na zdroji znečišťování a v místě příjemce (receptoru) k identifikaci a kvantifikaci příspěvku konkrétního zdroje (zdrojového typu) ke koncentraci znečišťující látky v místě příjemce (imisní odběrové místo).

Výsledky receptorového modelování mohou být porovnávány s výsledky disperzních modelů (rozptylové studie), které používají emisní parametry zdroje, meteorologická data a popis mechanismů chemické transformace k odhadu příspěvku každého emisního zdroje znečišťování ke koncentraci dané znečišťující látky v místě příjemce.

Základními požadavky pro uskutečnění receptorového modelování s dobrými výsledky je:

- stabilita emisních zdrojů v monitorovaném období
- nalezení všech významných emisních zdrojů, které přispívají k charakterizaci imisních míst
- chemické látky spolu nereagují, sčítají se lineárně
- počet zdrojů (kategorií zdrojů) je menší nebo roven počtu znečišťujících látek
- nejistoty měření jsou náhodné, není mezi nimi korelace a jsou normálně rozložené

V tomto matematickém modelu je koncentrace C_i látky i naměřená v receptoru vyjádřena jako:

$$C_i = \sum a_{ij} S_j + e_i$$

kde

- C_i je koncentrace látky i naměřená v receptoru
 a_{ij} je frakce látky i ve zdroji j
 e_i je rozdíl mezi naměřenou a vypočtenou koncentrací látky i
 S_j je hmotnostní příspěvek zdroje j

Účelem receptorového modelování je „přidělit“ imisní koncentrace $PM_{2,5}$; PM_{10} (případně jiné skupiny polutantů – PAH, VOC apod.) emisním zdrojům, tedy na základě imisního monitoringu identifikovat příspěvek emisního původce k danému znečištění. CMB model vyjadřuje všechny měřené koncentrace znečišťujících látek jako lineární součet produktů zdrojových profilů a příspěvků zdrojů a následně řeší sadu lineárních rovnic.

Vstupní informace do modelu obsahují:

- zdrojové profily znečišťujících látek (source profile) obsahující normalizovaná množství znečišťujících látek
- koncentrace znečišťujících látek zjištěné v místě receptoru (příjemce) – tedy údaje o imisních koncentracích
- reálné nejistoty pro zdrojové a receptorové hodnoty pro každou znečišťující látku, každý den imisního monitoringu a každý emisní zdroj

Výstupní informace z modelu obsahují:

- příspěvek každého zdrojového profilu k imisnímu zatížení

Práce s modelem představuje zejména:

- **zhodnocení použitelnosti modelu** (dostatečný počet znečišťujících látek, identifikace majoritních emisních znečišťovatelů v zájmové oblasti, existence vstupních hodnot s „rozumnými“ nejistotami)
- **výběr zdrojových profilů** s ohledem na potenciální původce (výsledky předběžných analýz jako korelační matice, meteorologická data, poloha jednotlivých zdrojů, typy zdrojů či technologií, které se vyskytují v zájmových oblastech, sezónní emitenti, nekolineární profily)
- **stanovení počátečního příspěvku zdroje (SCE)** – použití různých kombinací zdrojových profilů a volba vhodných znečišťujících látek (fitting species), stanovení vlivu změny kombinace těchto proměnných na výsledky receptorového modelování
- **zkoumání výstupů z modelu** – vyhodnocení smyslu prostorově a časově závislých výsledků s ohledem na převládající meteorologické podmínky a typy emisních zdrojů
- **ověření** jak přidání či odstranění některých znečišťujících látek či zdrojových profilů ovlivní výsledky receptorového modelování
- **identifikace odchylek od požadavků modelu** (viz. výše) – stabilita emisních zdrojů v čase, znalost emisních podpisů majoritních zdrojů, nezávislé zdrojové profily atd.)
- **identifikace a korekce** chyb vstupů do modelu (zvýšení nejistot, identifikace a označení chybějících dat -99., rozdělení zdrojů dle meteorologických dat)
- **ověření shody a stability SCE** (nahrazení různých profilů pro stejné zdrojové typy, přidání či odebrání znečišťujících látek z kategorie fit (vhodné), zkoumání příspěvků zdrojů pro individuální znečišťující látky)
- **vyhodnocení výsledků** modelu CMB8.2 s ohledem k metodám stanovení původců znečištění (porovnání SCE mezi různými imisními stanicemi, aplikace jiných receptorových metod a porovnání výsledků, aplikace disperzních modelů (rozptylová studie) a porovnání výsledků apod.)

1.1. Vyhodnocení výstupů z modelu CMB8.2

Součástí výstupních souborů modelu CMB8.2 je řada ukazatelů, charakterizujících kvalitu a spolehlivost prezentovaných výsledků, jedná se zejména o:

- **R^2** je využito k posouzení odchylky v imisních koncentracích znečišťujících látek, která je vyjádřena jako vypočtené koncentrace znečišťujících látek prostřednictvím lineární regrese. Maximální hodnota je 1.0, lepší SCE vysvětlí změřené koncentrace.
- **standard error** je odchylka SCE
- **chi square (χ^2)** je použito k posouzení nejistoty vypočtených koncentrací znečišťujících látek (vážená suma mocnin rozdílů mezi vypočtenou a změřenou koncentrací). Hodnoty menší než 1.0 indikují velmi dobrou shodu
- **percent mass** je procentní podíl sumy modelem spočítaných SCE k celkové naměřené koncentraci, hodnota blízko 100 procent může být matoucí, protože někdy i nekvalitní údaje mohou vést k velké percent mass
- **t-statistic** je poměr mezi SCE k její standardní odchylce. Standardní odchylka SCE je indikátorem precizního odhadu modelu. Hodnoty < 2.0 identifikují odhad modelu, který není významně rozdílný od 0
- **degrees of freedom** je počet znečišťujících látek označených jako fit (vstupujících do modelu) mínus počet zdrojů označených jako fit. Některé výzkumy doporučují $df \gg 5$
- **ratio of the mass** je poměr mezi vypočtenou koncentrací (C) a změřenou koncentrací (M) a slouží k identifikaci znečišťujících látek pod či nad hodnotou vypočtenou modelem. Ratio > 1.0 znamená, že více hmoty pro danou znečišťující látku bylo spočteno modelem než bylo naměřeno v imisním monitoringu
- **ratio of the residuals to the uncertainty** je rozdíl mezi C a M dělený nejistotou. Používá se k identifikaci znečišťujících látek pod či nad hodnotou vypočtenou modelem.
- **MPIN** (normalizovaná modifikovaná pseudo-inversní matice) diagnostikuje výstupy, indikuje stupeň vlivu každé znečišťující látky k příspěvku a standardní chybu odpovídající kategorie zdroje. MPIN je normalizována tak, že dává hodnoty od -1.0 do 1.0. Hodnoty v MPIN s absolutní hodnotou od 0.5 do 1.0 jsou spojeny se znečišťující látkou mající vliv na celkový příspěvek

1.2. Cílové hodnoty výsledkových parametrů

Parametr	Cílová hodnota
R^2	0,8 – 1
Standard error (STDERR)	< SCE
χ^2	< 4,0
percent mass	80 – 120 %
degrees of freedom	> 5
t-statistic (TSTAT)	> 2,0
ratio C/M (calculated/measured)	0,5 – 2,0
ratio R/U (residuals/uncertainties)	-2,0 – 2,0