

Mieczysław Borysiewicz, Wanda Kacprzyk

**KOMPUTEROWE NARZĘDZIA
WSPOMAGANIA ZARZĄDZANIEM ZAGROŻENIAMI
OD CHEMIKALIÓW UWOLNIONYCH
DO ŚRODOWISKA**

**COMPUTER SYSTEMS SUPPORTING MANAGEMENT
OF HAZARDS FROM CHEMICAL RELEASES
TO THE ENVIRONMENT**

Słowa kluczowe: WD-chem, systemy informatyczne, wspomaganie decyzji środowiskowych, modelowanie, transport i los chemikaliów w środowisku, zgrubne metody ocen narażenia, EPI, E-FAST, aplikacja ramowa MINS, modele meteorologiczne, MM5, modele emisji, SMOKE, modele transportu, CMAQ, analizy geoprzestrzenne, SADA, bazy danych, substancje chemiczne, ECOTOX, RAIS, IRIS, HEAST.

Keywords: chemicals, SWD-chem – environmental decision support systems, modelling, transport and fate of chemicals in the environment, screening methods of exposure evaluation, EPI (Estimation Program Interface), E-FAST (Exposure, Fate Assessment Screening Tool), MIMS (Multimedia Integrated Modelling System), meteorological models, MM5 (The fifth generation Mesoscale Model), emission models, SMOKE (Sparse Matrix Operator Kernel Emission modelling), atmospheric pollutant transport models, CMAQ (Community Multiscale Air Quality), data basis, ECOTOX (ECOTOXicology database), RAIS (Risk Assessment Information System), IRIS (Integrated Risk Information System), HEAST (Health Effects Assessment Summary Tables).

In the paper a prototype Environmental Decision Support System – SWD-Chem is presented. The system consists of modules and data bases for screening and detail calculations of the transport and fate of the chemicals in the environment and the consequences for human health and the environment. For detail analyses the software framework Multimedia Integrated Modelling System (MIMS) is used. For calculations of the transport of chemicals in the atmosphere air two system are adopted: Multiscale System

for Air Quality Simulations (CMAQ) and Sparse Matrix Operator Kernel Emission modeling (SMOKE).

CMAQ – Multiscale System for Air Quality Simulations is multiscale model for a lot of pollutants using modern techniques for simulations of all atmospheric and near ground processes influencing transport, conversion and deposition of pollutants and/or their predecessors for both local and regional scales. System has been designed as a scientific tool for modelling and solving all-important aspects related to the air quality problems (including photochemical oxidant, acid deposition, food and particles).

MIMS – Multimedia Integrated Modelling System is a framework application supporting designing, configuration and performing complex simulations using variety of models and tools related to them as iterators or analyses tools. MIMS performs modelling basing on user suggestions and dependently on type and amount of data user possesses.

MM5 – Mesoscale Model of the Earth Atmosphere. Implementation of the system on the Beowulf cluster at the Institute of Atomic Energy. The fifth generation model MM5 (NCAR/Penn State Mesoscale Model) is the last from the series, that began with mesoscale model developed by Anthes and Warner at the Pennsylvania State University on the early seventies. Since then the model has been changed many times as to make its applicable much wider. These extensions include (i) subgridding possibilities, (ii) nonhydrostatic dynamic of atmosphere, (iii) four dimensional data assimilation and more physical options (iv) possibilities to implement on different computer platforms.

System of modelling emissions SMOKE – Sparse Matrix Operator Kernel Emission modelling – simulates emissions of gases and particles to the atmosphere taking into account surrounding metrological conditions and performed socio-economical measures. Emissions are usually split into point sources, line sources (accidental release from source moving on the road) and area sources. Point source modules simulate emissions from single point (e.g. chimney). Line source modules simulate emissions that are long (e.g. from trucks). Area sources include moving sources not from the roads, biogenic emissions and other sources in relation to the area where population, animals and plants exist.

1. WPROWADZENIE

Wspomaganie zarządzania zagrożeniami generowanymi przez chemikalia występujące na określonym obszarze geoprzestrzennym wiąże się przede wszystkim z oszacowaniem wielkości możliwego ryzyka, czyli z uzyskaniem odpowiedzi na następujące pytania:

- 1) Kto lub co jest eksponowane na zagrożenie (środowisko, człowiek)?
- 2) Jakie są drogi narażenia?
- 3) Jaka może być wielkość ekspozycji?
- 4) Jak często i jak długo zagrożenie może występować?
- 5) Jakie mogą być skutki narażenia?

Analizę zagrożenia należy przy tym przeprowadzić dla każdej substancji chemicznej znacząco wpływającej na wielkość ryzyka z uwzględnieniem dróg narażenia. Stężenie substancji chemicznych oraz rodzaj kontaktu są najważniejszymi elementami szacowania wielkości narażenia. Uzyskane wyniki należy następnie powiązać z określeniem wielkości potencjalnych skutków determinowanych przez daną substancję. To prowadzi ostatecznie do oszacowania ryzyka, które mówi o prawdopodobieństwie wystąpienia określonych skutków w zagrożonym w środowisku/populacji.

Zarządzanie środowiskiem jest trudnym zadaniem, ponieważ należy przy tym wziąć pod uwagę wiele czynników. Wyróżnić można 3 obszary, w których komputery mogą okazać się pomocne.

Pierwszy obszar to złożone procesy modelowania środowiskowego. Modele mogą mieć różny zakres i dokładność – od prostych równań, które mogą być obliczone na komputerach osobistych, do potężnych programów działających najefektywniej na najnowocześniejszych superkomputerach.

Drugi obszar to zarządzanie dostępnymi informacjami. Integracja informacji z różnych źródeł jest konieczna w celu podejmowania świadomych decyzji. Ważnymi źródłami informacji mogą być dane obserwowane w terenie, wyniki symulacji lub dokumenty związane z polityką ekologiczną.

Ostatni, trzeci obszar obejmuje modelowanie samego procesu decyzyjnego, ułatwiające podejmowanie decydującym równoważonych decyzji, które są spójne z wiedzą o środowisku.

Reprezentatywne dane pomiarowe uzyskane w badaniach terenowych i/lub epidemiologicznych, w realistycznych warunkach, są dokładniejsze od przewidywań modeli. Jednakże modele mogą dostarczyć wielu użytecznych informacji w sytuacji braku takich pomiarów, a także mogą być użyte do przewidywania rozwoju sytuacji w wybranym obszarze. Przy podejściu opartym na modelach najodpowiedniejszym rozwiązaniem jest zastosowanie dwóch rodzajów narzędzi:

- 1) do szybkiego określenia priorytetów zagrożeń – takie oszacowania oparte są na minimalnym zestawie dostępnych danych, konserwatywnym podejściu (tzn. założeniu najgorszego wypadku) i prostych modelach, co zwykle prowadzi do przeszacowania;
- 2) do zaawansowanych oszacowań skupiających się na zagrożeniach o wysokim priorytecie – w tych oszacowaniach wykorzystuje się bardziej złożone modele i większą liczbę danych, a – w idealnym wypadku – są oparte na dobrze zaprojektowanych badaniach monitoringowych.

Przedstawione wymagania wymuszają, aby komputerowe systemy wspomagania decyzji środowiskowych (KSWDŚ) miały charakter wielowarstwowy – pierwsza warstwa powinna umożliwić szybką selekcję istotnych zagrożeń,

pozostałe zaś pozwolić precyzyjniej określić wielkości zagrożeń od wytypowanych źródeł i dla wyselekcjonowanych receptorów w ustalonych obszarach.

Podstawowymi elementami systemu powinny być zatem:

- 1) modele do szybkich oszacowań, zawierające wiele prostych modułów do estymacji własności fizyczno-chemicznych i losu substancji chemicznych w środowisku (np. współczynnik oktanol-woda, stała prawa Henry'ego, punkty wrzenia i ciśnienia pary, wielkość biodegradacji, zdolność do sorpcji, współczynniki hydrolizy, współczynnik biostężenia, okresy połowicznego rozpadu w różnych środowiskach, określenie wielkości udziału różnych faz itp.);
- 2) modele do zaawansowanych oszacowań, ściśle dopasowane do rozważanego scenariusza zagrożenia – modele te powinny być połączone z systemami informacji przestrzennej, zawierającymi m.in. informacje o populacji i ukształtowaniu terenu oraz dane batymetryczne; system informacji przestrzennej powinien być również sprzężony z systemami monitoringu środowiska: meteorologicznego, hydrologicznego oraz skażeń; modele muszą obejmować wszystkie elementy środowiska: powietrze, wody powierzchniowe i gruntowe, organizmy żywe oraz gleby, a także uwzględniać wszystkie drogi narażenia;
- 3) bazy danych do rankingu substancji chemicznych zawierające podstawowe własności chemiczne i fizyczne oraz reprezentatywne wartości pomiarowe umożliwiające wyznaczenie wielu istotnych parametrów modelowych, takich jak: określenie stopnia rozpuszczalności w wodzie, zachowania się pary, oszacowania biodegradacji, sorpcji, zachowania się w powietrzu, glebie oraz wodach powierzchniowych i gruntowych; ponadto określone powinny być procedury wyznaczające stężenie dla każdej substancji w określonych warunkach środowiskowych oraz tryb ustalenia priorytetowych zagrożeń.

Obecnie zgodnie z przyjmowanymi wymaganiami dotyczącymi zaawansowanych systemów wspomaganie decyzji środowiskowych¹, system taki powinien m.in.:

- 1) mieć strukturę modułową wraz z odpowiednimi interfejsami umożliwiającymi jednolite zarządzanie całym systemem;
- 2) zapewnić umożliwienie dołączenia zaawansowanych naukowo modułów procesów transportu i losu chemikaliów w różnych elementach środowiska, mogących służyć jako podstawowe elementy dla wdrożenia systemu informatycznego;
- 3) zapewnić wdrażanie skutecznych algorytmów numerycznych dla spełnienia wzrastających żądań złożonych wieloskalowych, wielośrodkowych, wielowymiarowych modeli środowiskowych;

¹ W tym m.in. sformułowane w Centrum Obliczeniowym Północnej Karoliny (NCSCC).

- 4) umożliwić wdrożenie innowacyjnych technik w zakresie rozwiązywania niezgodności przestrzennych i czasowych napotkanych podczas modelowania wieloskalowego i wielośrodkowego, łącznie z silną integracją analizy geoprzestrzennej i symulacji procesów środowiskowych;
- 5) stanowić jednolite środowisko informatyczne modelowania środowiskowego dla wielu czynników stresogennych, skal i ośrodków, na potrzeby decydentów oraz ośrodków badawczych;
- 6) umożliwić wdrożenie dynamicznych i inteligentnych środowisk użytkownika, które byłyby pomocne w ocenie i syntezie danych, informacji i wiedzy na temat transportu i losu chemikaliów w środowisku; obejmuje to parametryzację modelu, analizę niepewności/podatności oraz innowacyjne techniki wyjścia dla wizualizacji, analizy i interpretacji wielu zmiennych;
- 7) wykorzystywać pełny zakres technologii obliczeniowych, od komputerów osobistych do przetwarzających równoległe superkomputerów dostępnych w sieci;
- 8) umożliwić wizualizację wyników w przystępnej formie (np. w postaci tabel, wykresów oraz map cyfrowych) i sporządzanie raportów.

2. KOMPUTEROWY SYSTEM WSPOMAGANIA ZARZĄDZANIEM ZAGROŻENIAMI CHEMICZNYMI

Charakterystyka systemu SWD-Chem. Prototypowa wersja komputerowego systemu wspomagania zarządzaniem zagrożeniami chemicznymi (SWD-Chem)² składa się z dwóch grup oprogramowania:

- 1) pakietu programów do zgrubnych ocen zagrożeń człowieka i środowiska powodowanych przez uwolnienia substancji chemicznych do środowiska;
- 2) otwartego środowiska informatycznego, umożliwiającego prowadzenie zintegrowanych analiz obiegu (transport i los) chemikaliów w różnych komponentach środowiska (powietrze, woda, gleba).

² Opracowana w ramach pracy badawczej pt. „Podstawy metodyczne budowy systemu zarządzania bezpieczeństwem chemicznym na szczeblu krajowym i regionalnym”, realizowanej w Instytucie Ochrony Środowiska w latach 2002–2003, a finansowanej ze środków KBN w ramach Programu Wieloletniego pn. „Dostosowywanie warunków pracy w Polsce do standardów Unii Europejskiej”. Uzyskane wyniki dostępne na portalu internetowym <http://manhaz.cyf.gov.pl/manhaz>. Prace z tego zakresu są wspólnie prowadzone przez pracowników Instytutu Ochrony Środowiska oraz Centrum Doskonałości: Zarządzanie Zagrożeniami dla Zdrowia i Środowiska „MANHAZ” (Management of Health and Environmental Hazards).

Zakres analizy zagrożeń środowiska. System SWD-Chem umożliwia przeprowadzenie analizy zagrożeń środowiska w trzech etapach:

- 1) etap I obejmuje zgrubne analizy ryzyka, mające na celu identyfikację ważnych czynników stresu środowiskowego i istotnych dróg narażenia oraz oszacowanie względnego ryzyka i narażonych receptorów; na tym etapie stosowane są konserwatywne założenia odnośnie scenariuszy narażeń i kryteriów identyfikacji;
- 2) etap II obejmuje wykonanie dokładniejszych ocen w odniesieniu do wyselekcjonowanych receptorów, czynników stresu i dróg narażenia; na tym etapie stosuje się bardziej realistyczne założenia dotyczące narażenia, biodostępności, użytkowania terenu i skutków toksycznych, umożliwiające zastosowanie bardziej zaawansowanych modeli obliczeniowych, opartych na równaniach różniczkowych wykorzystywanych do obliczeń ciągłych procesów przepływu masy i energii, z uwzględnieniem zależności czasowo-przestrzennych;
- 3) etap III obejmuje uściślenie oszacowania uzyskanego w etapie II w wyniku uwzględnienia danych pomiarowych z ocenianego obszaru i przeprowadzenia oszacowań błędów wyników otrzymanych w trakcie analiz.

Zgrubne metody ocen narażenia. Do przeprowadzenia zgrubnych metod ocen narażenia wykorzystano pakiet programów amerykańskiej Agencji Ochrony Środowiska obejmujący:

- 1) program EPI,
- 2) moduł E-Fast.

Program EPI służy do przeprowadzenia konserwatywnej oceny narażenia na podstawie dostarczanych oszacowań fizycznych i chemicznych właściwości chemicznych, ważnych dla modelowania ich losu w środowisku, który zawiera następujące moduły:

- 1) AOPWIN – szacujący prędkości utleniania w atmosferze,
- 2) BCFWIN – szacujący współczynnik biokoncentracji (BCF),
- 3) BLOWIN – szacujący prawdopodobieństwo biodegradacji,
- 4) ECOSAR – szacujący wodną toksyczność (LD_{50} , LC_{50}),
- 5) HENRYWIN – szacujący stałą prawa Henry’ego,
- 6) HYDROWIN – szacujący prędkości wodnej hydrolizy (katalizacja kwasowa i podstawowa),
- 7) KOWWIN – szacujący współczynnik podziału oktanol-woda,
- 8) MPBPWIN – szacujący punkt topienia, punkt wrzenia i ciśnienie gazu,
- 9) PCKOCWIN – szacujący współczynnik sorpcyjny gleby (Koc),
- 10) WSKOWWIN – szacujący rozpuszczalność w wodzie.

Program EPI został zaprojektowany specjalnie w celu uruchamiania wymienionych wyżej dziesięciu programów i pobierania do nich danych wyjściowych oraz automatycznego uruchamiania tych programów w odpowiedniej kolejności bez konieczności udziału użytkownika.

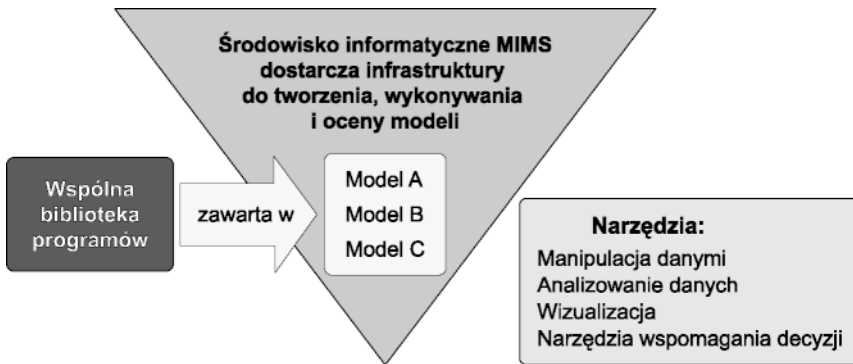
Moduł E-FAST jest wykorzystywany przy przeprowadzaniu konserwatywnego oszacowania potencjalnych wielkości dawek inhalacyjnych, wchłanianych drogą pokarmową i przez skórę, chemikaliów uwalnianych do powietrza i wód powierzchniowych oraz pochodzących z produktów konsumenckich (specjalny, dodatkowy moduł CEM). Do uruchomienia modelu E-FAST potrzebne są następujące dane:

- 1) w odniesieniu do wszystkich elementów środowiska:
 - oszacowania uwolnień do powietrza, wód i gleby (masa/czas),
 - częstotliwości i czasu trwania uwolnień (np. dni/rok);
- 2) w odniesieniu do uwolnień do wód:
 - usuwanie zanieczyszczeń podczas oczyszczania ścieków (%),
 - usuwanie zanieczyszczeń w procesie uzdatniania wody pitnej (%), jeśli znane,
 - oszacowana część, która ulegnie sorpcji do szlamu i pozostanie w szlamie (bezwymiarowe),
 - współczynnik biokoncentracji (mg/kg/mg/L),
 - rozpatrywane stężenie ($\mu\text{g/L}$) (tj. ostry i/lub chroniczny rozpatrywany poziom dla ochrony organizmów wodnych);
- 3) w odniesieniu do uwolnień do gleby: oszacowany potencjał migracji do wód podziemnych ze składowisk odpadów (oszacowany na podstawie fizykochemicznych właściwości i fizycznej formy składowanych substancji);
- 4) w odniesieniu do emisji do powietrza: oszacowany poziom usuwania zanieczyszczeń przez urządzenia ochrony powietrza lub przez spalanie (%);
- 5) w odniesieniu do chemikaliów obecnych w produktach konsumenckich:
 - masa cząsteczkowa,
 - część masy produktów konsumenckich (jeśli dotyczy),
 - zmierzone lub oszacowane ciśnienie pary dla rozpatrywanej substancji chemicznej.

Multimedialne zintegrowane środowisko modelowania (MIMS)³. W prototypowej wersji komputerowego systemu wspomagania zarządzaniem zagrożeniami chemicznymi (SWD-Chem) w zakresie analiz szczegółowych podjęto próbę spełnienia wymagań odnośnie rozwiązań informatycznych zaprezen-

³ Multimedia Integrated Modelling System.

wanych we wprowadzeniu. W tym celu wykorzystano opracowane w USA na potrzeby Agencji Ochrony Środowiska multimedialne zintegrowane środowisko modelowania. Jest to aplikacja ramowa wspomagająca projektowanie, konfigurowanie i przeprowadzanie złożonych symulacji z wykorzystaniem różnorodnych modeli i związanych z nimi narzędzi (rys. 1). Modelowanie za pomocą MIMS jest oparte na podanych przez użytkownika wskazówkach uzależnionych od rodzaju i liczby danych, którymi użytkownik dysponuje. Ramowa aplikacja modelująca MIMS oferuje użytkownikowi interfejs, który pozwala przygotowywać szeroko zakrojone projekty, z wykorzystaniem wielu różnych programów i baz danych, zapewniając dostęp do plików, bibliotek i programów wykonawczych, a jednocześnie łączy wszystkie te elementy, co umożliwia użytkownikowi sprawniejsze i szybsze przeprowadzanie działań. Używanie MIMS motywuje też badaczy/naukowców do stosowania ujednoczonych formatów, ułatwiających wymianę i rozpowszechnianie informacji. System MIMS umożliwia przepływ i wymianę informacji, w tym danych wejściowych i wyjściowych, pomiędzy kompatybilnymi modelami środowiskowymi. Korzystając z MIMS użytkownicy mogą w jednej aplikacji połączyć modele dotyczące różnych mediów środowiskowych (powietrza, powierzchni ziemi, wód powierzchniowych, wód podziemnych, organizmów żywych), dzięki czemu mogą prowadzić badania symulacyjne obejmujące całość ekosystemu. System MIMS działając jak pojedyncza struktura ramowa, przyczynia się do używania wspólnych zestawów danych i nieustannie zmienia się, tak aby najlepiej opisywać interakcje zachodzące na naturalnych powierzchniach styku różnych mediów (np. powietrze–wody powierzchniowe, wody powierzchniowe–wody podziemne).



Rys. 1. Elementy zintegrowanego środowiska informatycznego MIMS

Fig. 1. Elements of the integrated modelling system MIMS

System multimedialnego zintegrowanego środowiska modelowania (MIMS) służy użytkownikowi jako swoista, zintegrowana biblioteka, zawierająca zestawy danych, programy wykonawcze oraz inne narzędzia i sekwencje operacyjne (tzw. elementy MIMS). Elementy systemu MIMS mogą być wymieniane zarówno między użytkownikami, jak i między poszczególnymi projektami (rys. 1).

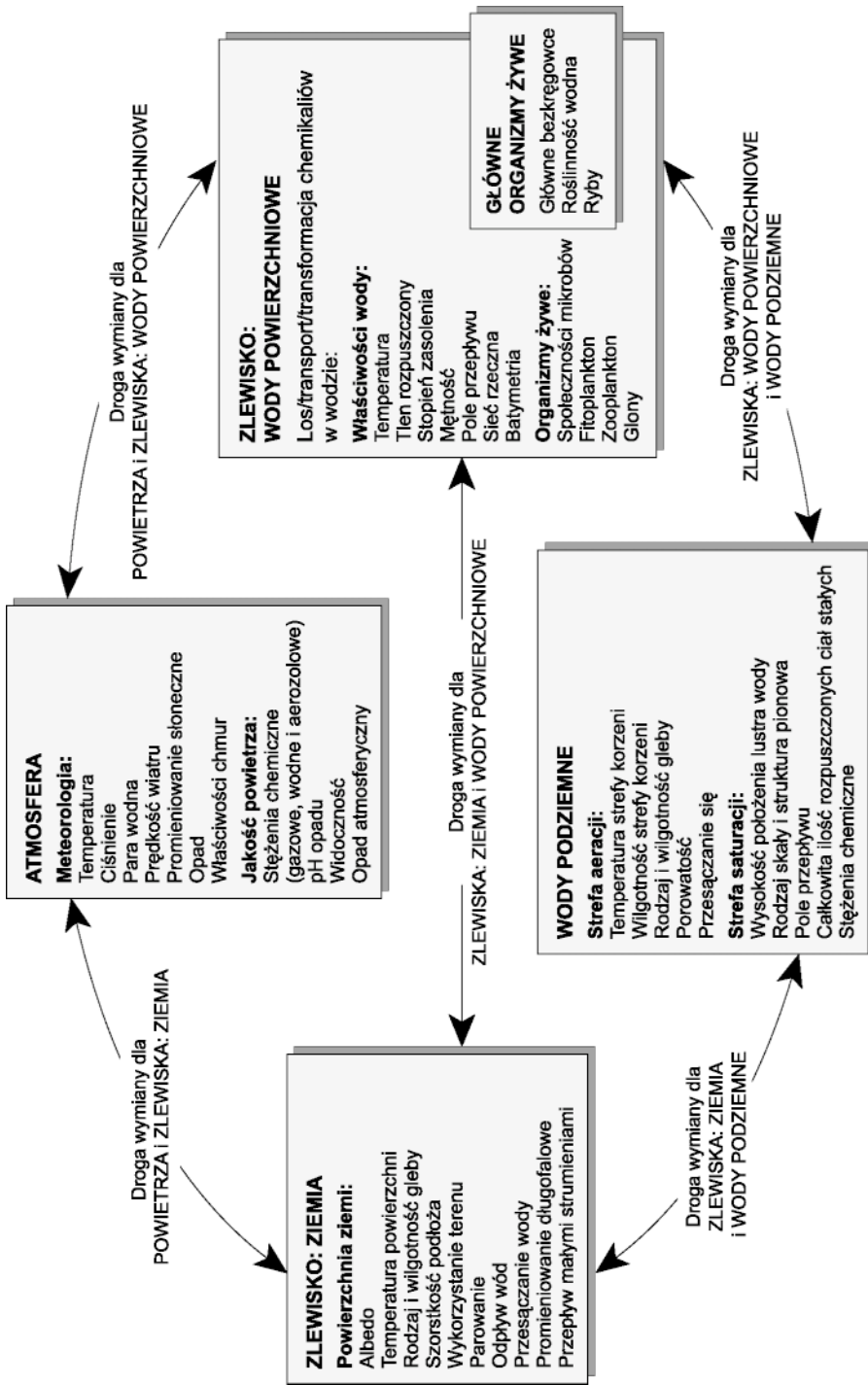
System MIMS oferuje użytkownikowi elastyczny sposób integrowania podczas budowy scenariusza różnorodnych narzędzi (modeli, narzędzi analitycznych, narzędzi gridujących, iteratorów, zestawów danych itp.). System ten kieruje sposobem komunikacji między narzędziami i ustawieniami parametrów wybranych narzędzi obsługi wskazanych scenariuszy. Zdolność koordynowania różnorodnych modeli i narzędzi jest centralną cechą tego systemu. Dzięki temu użytkownik ma możliwość:

- 1) wizualnego przedstawienia przepływu danych używanych w trakcie modelowania,
- 2) kopiowania specyfikacji dla modelu złożonego i modyfikowania ich przy kolejnych uruchomieniach modelu,
- 3) kontrolowania różnych programów poprzez graficzny interfejs użytkownika, co eliminuje konieczność edytowania skryptów i plików kontrolnych,
- 4) uruchamiania złożonego modelowania w środowisku Windows i współpracy z użytkownikami innych platform,
- 5) łączenia modeli wykorzystujących różny krok czasowy lub różne siatki przestrzenne (przyszłe wersje aplikacji),
- 6) łatwiejszego integrowania różnych modeli,
- 7) gwarancję, że podczas powtarzania symulacji pomiędzy modelami wymieniane są poprawne wartości wejściowe,
- 8) automatyzacji zadań powtarzalnych, takich jak badania niepewności metodą Monte Carlo,
- 9) integrowania narzędzi analizy danych w celu wykorzystywania ich podczas przeprowadzania symulacji oraz do badania wyników symulacji,
- 10) wykorzystywania ścieżek obliczeniowych wypracowanych już przez badaczy zajmujących się danym problemem.

System MIMS umożliwia modelowanie zjawisk zachodzących w różnych elementach środowiska (rys. 2).

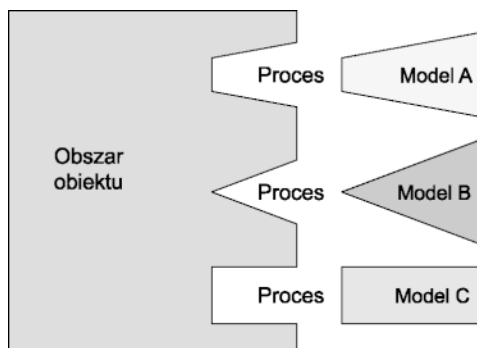
W celu stworzenia elastycznej i solidnej metody łączenia i wymiany modeli i zestawów danych wykorzystano w MIMS zmodyfikowaną wersję paradygmatu modelowania z systemu architektury o dynamicznej informacji DIAS⁴

⁴ System opracowany przez Narodowe Laboratorium w Argonne USA.



Rys. 2. Schemat zjawisk zachodzących w środowisku, które mogą być modelowane przy pomocy MIMS
 Fig. 2. Chemical pathways in the environment which can be modeled by MIMS

oraz bibliotekę oprogramowania wspierającego DIAS. W paradygmacie DIAS jedną lub więcej modelujących osób rozkłada będący przedmiotem model systemu na obszary przedstawiające istotne zagadnienia lub pomysły do uwzględnienia w obliczeniach. Przykładami takich obszarów mogą być: warstwa wodonośna, źródło zanieczyszczeń, atmosfera, domy i populacja ryb. Każdy obszar charakteryzują parametry i procesy. Parametry to cechy opisujące obszar, a procesy są zachowaniami, które wykazuje obszar. Modele umożliwiają wiązanie procesów aktywnych do symulacji (rys. 3).

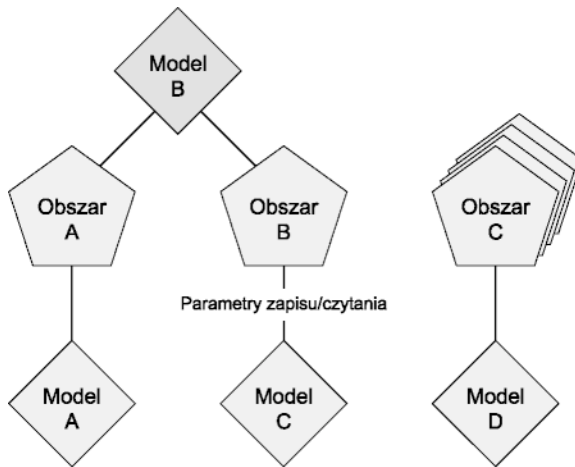


Rys. 3. Modele są narzędziami wdrażania procesów przewidzianych w obszarze obiektu, które są wybierane do obliczeń symulacyjnych wybranych scenariuszy

Fig. 3. Models are considered to be tools for handling of processes in the area of selected objects for simulation of selected scenarios

Każdy model jest zdefiniowany tak, aby mógł pobierać i zapisywać dane do parametrów obszaru. W rzeczywistości parametry każdego obszaru służą za standard wszelkich informacji o tym obszarze.

Obszar A np. może przedstawiać jezioro (rys. 4). Jego parametry mogą obejmować głębokości, temperatury oraz stężenia azotu. Obszar B może przedstawiać obszar miejski z takimi parametrami, jak populacja, rodzaj oczyszczania ścieków oraz działalność gospodarcza. Za pomocą modelu B można wprowadzić proces uwolnienia przez obliczenie ilości substancji odżywczych, którą obszar miejski dostarcza do jeziora. Za pomocą modelu A można wprowadzić procesy chemiczne zachodzące w wodzie przez obliczenie stężenia substancji odżywczych w jeziorze. Ponieważ każdy model jest definiowany w kontekście standardów danych dostarczonych przez obszary, modele nie są związane bezpośrednio z innymi modelami. Umożliwia to osobie modelującej wymianę modelu, wprowadzenie dodatkowego procesu bez wywierania wpływu na inne modele obecne w systemie, łatwe usunięcie modeli z symulacji i wprowadzenie



Rys. 4. Modele są zdefiniowane tak, aby można było odczytywać informacje i zapisywać je na obszary

Fig. 4. Models are defined in a way facilitating transfers of data to and out of selected domains

w to miejsce zestawów danych zawierających ten sam rodzaj informacji co dane produkowane przez model. Programy analizy danych i oceny modeli mogą także być włączone w scenariuszach jako „modele”.

Rozwiązania oprogramowania MIMS zawierają wiele udogodnień wspomagających użytkownika w zakresie:

- 1) **konfigurowania modeli obliczeniowych dla symulacji określonych scenariuszy** (z chwilą, gdy użytkownik zdefiniuje nowy scenariusz obliczeniowy MIMS przekazuje opis tego scenariusza do systemu zarządzającego biblioteką DIAS, który przywołuje odpowiednie modele w odpowiedniej kolejności),
- 2) **wykonywania obliczeń iteracyjnych** (obliczenia czułości i analizy niepewności, kalibracja modeli i ich optymalizacja wymagają wielokrotnych obliczeń tych samych scenariuszy. MIMS zawiera pakiet dedykowany do takich obliczeń opartych na metodach Monte Carlo),
- 3) **ułatwienia manipulacji danymi przestrzennymi** (MIMS ma specjalny model dedykowany do takich operacji, oparty na technikach GIS),
- 4) **przedstawienia graficznego danych wejściowych i wyników symulacji** (MIMS ma specjalny pakiet do różnorodnych prezentacji danych wejściowych i wyników symulacji w postaci wykresów, diagramów, zestawień i map tematycznych).

System MIMS umożliwia zintegrowanie środowiskowych systemów modelowania emisji i transportu substancji w powietrzu za pomocą zaawansowa-

nych pakietów programów, takich jak SMOKE⁵ i CMAQ⁶, oraz numerycznego prognozowania przewidywania parametrów meteorologicznych, takich jak MM5.

System SMOKE. System ten służy do analizy uwolnień substancji chemicznych do środowiska, bazującej na modelowaniu emisji za pomocą rzadkich macierzy. W najnowszej wersji 2.1 tego systemu nie ma już ograniczeń ilości jednocześnie przetwarzanych substancji emitowanych ze wszystkich źródeł. Najważniejszym elementem systemu jest symulacja rozprzestrzeniania substancji gazowych, takich jak: tlenek węgla, tlenki azotu, lotne węglowodory organiczne, dwutlenek siarki i pyły, w szczególności pył PM 2,5 i PM 10.

Niezwykle ważne znaczenie mają zanieczyszczenia substancjami toksycznymi takimi, jak: rtęć, kadm, benzen. W aktualnej nowej wersji systemu zostały wbudowane mechanizmy BEIS2 i BEIS3 do obsługi źródeł emisji biogenicznych. Podstawowym celem systemu SMOKE jest przetworzenie danych wejściowych dotyczących emisji w dane wejściowe w siatkach obliczeniowych w celu dalszego przetwarzania przez modele dotyczące jakości powietrza. Typowe pierwotne dane wejściowe to: całkowite emisje roczne dla określonych źródeł lub średnie emisje dobowe. Typowe modele jakości powietrza natomiast wymagają danych w odstępach godzinnych w oczkach siatki i dla każdego rodzaju modelowanej substancji chemicznej. W związku z tym typowe przetwarzanie danych wejściowych do SMOKE obejmuje transformację tych danych do informacji o emisjach w wybranej siatce czasowo-przestrzennej stosowanej do obliczeń w modelach jakości powietrza. Rodzaje źródeł emisyjnych, które są przetwarzane przez SMOKE, to: stacjonarne źródła powierzchniowe, toksyczne źródła punktowe i źródła mobilne.

Emisję ze źródeł mobilnych SMOKE oblicza na podstawie danych dotyczących ich aktywności (np. natężenie ruchu itp.) z wykorzystaniem współczynników emisji stosowanych w modelu Mobile 6. W odniesieniu do emisji ze źródeł powierzchniowych w SMOKE stosuje się modele BEIS2 i BEIS3 do obliczeń emisji z gleby i roślinności, przy wykorzystaniu informacji opartych na danych meteorologicznych w godzinnych przedziałach czasu. Przebiegi SMOKE mogą być przeprowadzone z wykorzystaniem dwóch podejść⁷: przez wykorzystanie skryptów Unixa lub środowiska informatycznego MIMS.

⁵ Sparse Matrix Operator Kernel Emissions, opracowany w Ośrodku MCNC Environmental Modelin Center, jest rozwijany przez Uniwersytet Północnej Caroliny w USA.

⁶ Community Multiscale Air Quality (CMAQ).

⁷ Obydwa podejścia zostały wykorzystane przy adaptacji systemu SMOKE2 do systemu Beowulf w Instytucie Energii Atomowej.

W odniesieniu do każdej kategorii źródeł procesor emisji wykonuje następujące zadania:

- 1) wczytuje pliki z danymi dotyczącymi spisu emisji;
- 2) (opcjonalnie) prognozuje emisje na podstawie danych dotyczących określonego roku na modele dla innych (przyszłych/minionych) lat;
- 3) przekształca gatunki będące w spisie w gatunki mechanizmów chemicznych określone przez model jakości powietrza;
- 4) (opcjonalnie) stosuje kontrolę spójności danych emisyjnych;
- 5) modeluje czasowy rozkład emisji, uwzględniając możliwy wpływ warunków meteorologicznych;
- 6) modeluje przestrzenny rozkład emisji;
- 7) wykonuje badanie jakości wprowadzanych danych i wyników.

Modelowanie emisji jest rozbijane przez SMOKE na następujące etapy:

- 1) **ustalenie struktury danych:** uporządkowanie danych w wektory danych emisji, aby można było przeprowadzać działania na macierzach;
- 2) **prognozowanie na przyszłość/przeszłość:** obliczenie i zastosowanie współczynników prognozowania dla spisu emisji;
- 3) **przetwarzanie czasowe:** przypisanie emisji godzinom epizodu modelowania;
- 4) **proces rozdzielania chemicznego:** tworzenie rzadkiej macierzy współczynników rozdzielania chemicznego;
- 5) **przetwarzanie przestrzenne:** tworzenie rzadkiej macierzy współczynników przypisania przestrzennego;
- 6) **przetwarzanie kontroli:** tworzenie rzadkiej macierzy współczynników kontroli;
- 7) **transformacja emisji:** tworzenie iloczynu wszystkich macierzy i działanie powstałą macierzą na wektor spisu emisji.

Powyższe uporządkowanie ma liczne zalety. Po pierwsze, procesy są znacznie bardziej niezależne od siebie i członowe, zwiększając w ten sposób możliwość ponownego użycia danych. Na przykład, ten sam plik poziomu emisji źródłowych z podziałem na kroki czasowe jest wykorzystywany w podstawowym wypadku, jak również w strategii kontroli oraz dla każdej siatki z siatek zagnieżdżonych. Po drugie, pozwala uniknąć wielu kosztownych ponownych obliczeń. Wdrożenie nowej strategii kontroli, uwzględniającej na przykład źródła stacjonarne, wymaga zazwyczaj jedynie stworzenia nowej macierzy kontroli oraz nowej macierzy transformacji, która jest potem wykorzystywana przez moduł transformacji emisji. Czas konieczny do przetworzenia nowej strategii kontroli jest wobec tego znacznie krótszy, rzędu minut, w porównaniu z kilkoma dniami potrzebnymi przy wykorzystaniu tradycyjnego prze-

tworzenia emisji, wymagającego ponownego uruchomienia całego procesora emisji.

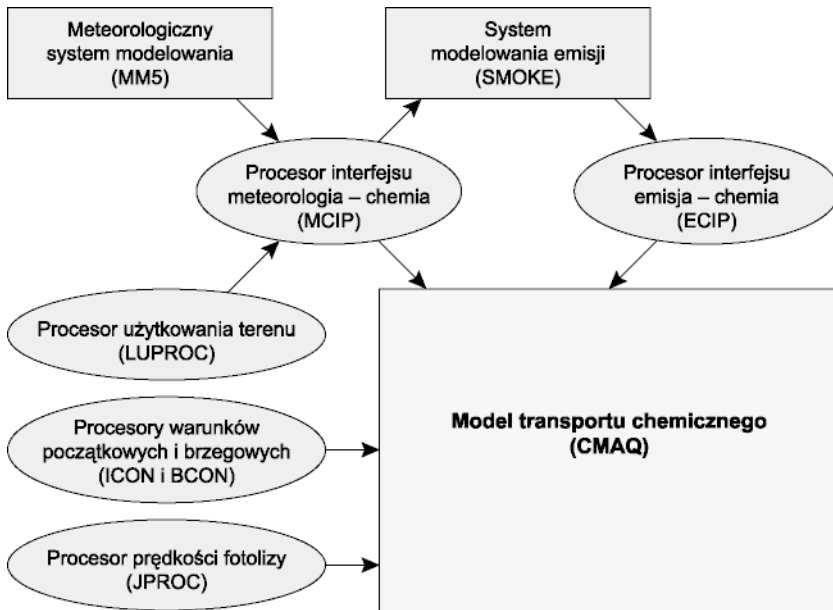
Najlepsze osiągi obliczeniowe SMOKE uzyskuje przy wykorzystaniu współczesnych architektur HPC⁸, ponieważ równoległość operacji na wektorach i macierzach jest wtedy jawna. Skorzystanie ze specyficznego uporządkowania źródeł eliminuje poszukiwania zmniejszające osiągi zwykłych procesorów emisji. Eliminowane są zbędne zapisy emisji, co zmniejsza znacznie wymagania dotyczące miejsca na przechowanie danych oraz zwiększa spójność danych.

Model CMAQ. Jest to model wieloskalowy trzeciej generacji dla wielu zanieczyszczeń, wykorzystujący nowoczesne techniki symulacji wszystkich procesów środowiskowych mających wpływ na transport, przekształcanie i depozycję zanieczyszczeń z powietrza zarówno w skali lokalnej, jak i regionalnej. Model zaprojektowano jako narzędzie do całościowego rozpatrywania wszystkich ważnych zagadnień związanych z powietrzem (łącznie z utleniaczami fotochemicznymi, pyłem zawieszonym, depozycją kwaśną i substancjami odżywczymi).

System modelowania CMAQ (rys. 5) zawiera następujące procesory:

- 1) **procesor interfejsu emisja – chemia (ECIP)**, który pobiera dane z modelu emisji MEPS w celu wykorzystania w CCTM, tworzy godzinne, trójwymiarowe dane emisji dla CMAQ z osobnych plików z rodzajem źródła tworzonych przez MEPPS, zawierających źródła liniowe (emisje z pojazdów), obszarowe i punktowe, a następnie oblicza wzrost i początkowe pionowe rozprzestrzenienie obłoku dla źródeł punktowych emisji dla określenia pionowych poziomów CCTM, dla których powinny być wprowadzone emisje źródeł punktowych; ponieważ warunki meteorologiczne mają wpływ zarówno na wzrost źródła punktowego obłoku, jak i na emisje biogeniczne, dane meteorologiczne z MCIP są także wykorzystywane w ECIP;
- 2) **procesor interfejsu meteorologia – chemia (MCIP)**, który pobiera i przetwarza dane wyjściowe z modelu meteorologicznego dla CCTM, włącza dane meteorologiczne, jeżeli istnieje taka potrzeba, konwertuje między systemami współrzędnych, oblicza parametry obłoku oraz oblicza parametry powierzchniowej i planetarnej warstwy granicznej (PBL) dla CCTM; procesor ten wykorzystuje informacje o użytkowaniu terenu z procesora użytkowania terenu (LUPROC) w celu obliczenia parametrów PBL i powierzchniowych;
- 3) **procesory początkowych i brzegowych (granicznych) warunków (ICON i BCON)**, które dostarczają pól stężeń odpowiednio dla poszczególnych substancji chemicznych na początek symulacji i dla siatek okrążających prze-

⁸ high-performance computing



Rys. 5. Powiązania systemu modelowania emisji i meteorologicznego systemu modelowania z modelem chemicznego transportu CMAQ i z procesorami interfejsów dla CMAQ

Fig. 5. Links between models of atmospheric chemical transport of CMAQ, the emission modelling system and the numerical weather prediction system

strzeń modelu, wykorzystując dane dostarczone z poprzednich trójwymiarowych symulacji modelowych lub z profili pionowych czystej troposfery; zarówno profile pionowe, jak i wymodelowane pola stężeń posiadają specyficzne mechanizmy chemiczne związane ze sobą, które pokazują, w jaki sposób te pliki zostały stworzone;

- 4) **procesor prędkości fotolizy (JPROC)**, który oblicza czasowo różne prędkości fotolizy, wymaga pionowych profili ozonu, profili temperatury, profilu stężenia liczby aerozolu oraz albedo powierzchni ziemi w celu obliczenia prędkości fotolizy dla CCTM; procesor wykorzystuje te informacje w modelach transferu radiatywnego w celu obliczenia przepływu aktywnego niezbędnego do obliczenia prędkości fotolizy.

Modelowanie obłoku w siatce (PinG). System modelowania CMAQ zawiera algorytmy dla fizycznych i chemicznych procesów mających wpływ na zanieczyszczenia w obłokach uwolnionych z wybranych dużych źródeł punktowych (MEPSE) w skali podsiatki. Moduły PinG symulują wzrost i powiększanie obłoku oraz istotne dynamiczne i chemiczne procesy w obłokach podsiatki;

mogą być używane do symulacji przy wielkości komórek 36 km i 12 km; przy komórkach 4 km nie stosuje się modułów PinG, a emisje MEPSE są bezpośrednio uwalniane do komórek siatki CTM 3-D.

Procesy w obłokach. Prawidłowe opisy obłoków są nieodzowne w modelach jakości powietrza ze względu na krytyczną rolę w transporcie atmosferycznym zanieczyszczeń i w procesach chemicznych. Obłoki mają zarówno bezpośredni, jak i pośredni wpływ na stężenia zanieczyszczeń – bezpośrednio zmieniają stężenie przez wodne reakcje chemiczne, pionowe mieszanie oraz procesy usuwania przez mokrą depozycję, a pośrednio mają wpływ na stężenia przez zmienianie radioaktywnych transmitancji, mających wpływ na prędkości fotolizy i na przepływy biogeniczne. W systemie CMAQ są modelowane głębokie chmury konwektywne i płytkie chmury przy użyciu algorytmów wdrożonych w RADM dla wielkości komórek 36 i 12 km.

Modelowania meteorologiczne i modelowania emisji. Model CMAQ do realizacji obliczeń rozprzestrzeniania się i losu zanieczyszczeń emitowanych do powietrza potrzebuje systemu modelowania meteorologicznego piątej generacji (MM5)⁹, który generuje pola meteorologiczne w różnych skalach przestrzenno-czasowych, oraz takiego systemu modelowania emisji jak SMOKE. Powiązania tych systemów z CMAQ przedstawiono na rysunku 6.

Narzędzia wspomagania analiz geoprzestrzennych danych pomiarowych. Jednym z elementów systemu SWD-Chem jest moduł pozwalający na przeprowadzenie typowych analiz geoprzestrzennych:

- 1) oceny przestrzennych korelacji między danymi,
- 2) modelowania takich korelacji,

oraz

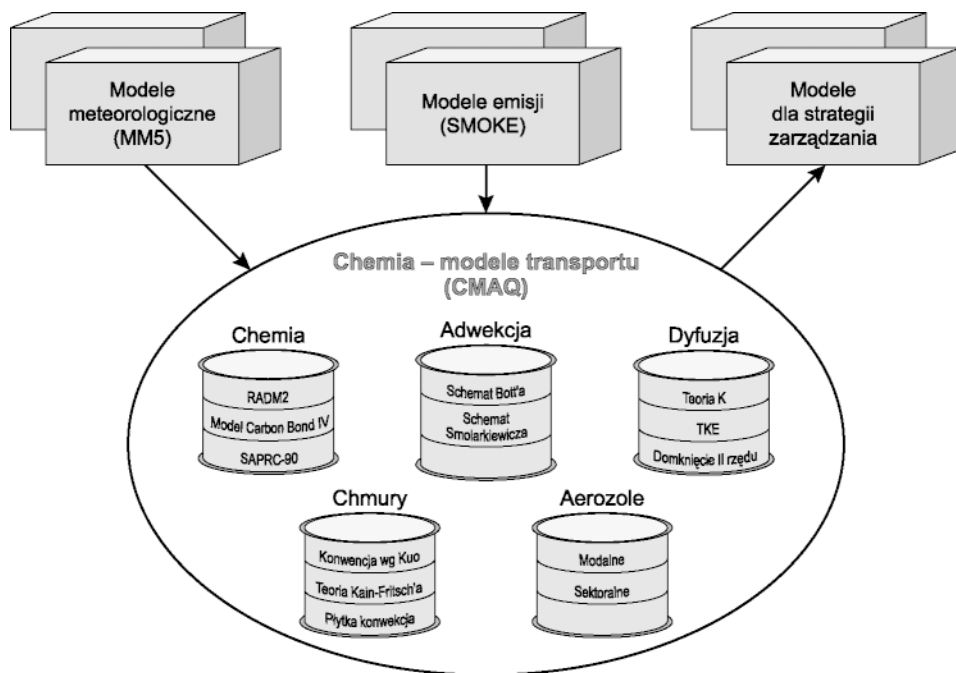
- 3) wizualizacji przestrzennych rozkładów stężeń, ryzyka i innych wyników analiz w zależności od preferencji użytkownika.

Do realizacji tych celów zaadaptowano w ramach SWD-Chem pakiet SADA¹⁰.

Interakcyjne bazy danych. Na potrzeby systemu wspomagania decyzji w zakresie zarządzania chemikaliami w środowisku SWD-Chem zaadoptowano pakiet baz danych: ECOTOX i RAISIR, zawierających podstawowe dane o właściwościach substancji chemicznych niezbędne do modelowania procesów transportu i losu chemikaliów w środowisku oraz skutków dla człowieka i środowiska.

⁹ Opracowany w Pennsylvania State University/National Centre for Atmospheric Research.

¹⁰ Spatial Analysis and Decision Assistance, opracowanego przez Instytut Modelowania Środowiskowego na Uniwersytecie Tennessee w USA.



Rys. 6. Zależność między systemami modelowania współpracującymi z CMAQ

Fig. 6. Interrelation between CMAQ and other systems providing data for simulations by CMAQ

Baza ECOTOX¹¹, zasilana na podstawie publikowanych danych literaturowych, zawiera cztery niżej wyszczególnione grupy informacji dotyczących poszczególnych 7523 chemikaliów wraz ze środkami ochrony roślin i 5305 gatunków:

- 1) ekotoksykologiczne parametry docelowe: BAF, BCF, BCFD, EC₅₀, ED₅₀, IC₅₀, LC₅₀, LD₅₀, LETC, LOEC, LOEL, LT₅₀, MATC, NOERC, NOEL, NR-LETH, NR-ZERO, T_{1/2},
- 2) grupy efektów toksycznych: akumulacja, zachowanie się, skutki biochemiczne, skutki na poziomie komórkowym, wzrost, śmiertelność, skutki dla populacji, reprodukcji i dla ekosystemów,
- 3) ośrodki narażenia: woda (słona, słodka), gleba (naturalna, sztuczna, humusowa, zmineralizowana, odpadowa i nawożona),
- 4) drogi narażenia: m.in. droga lądowa, droga wodna (wymywanie, przepływ, pływy).

¹¹ Opracowana przez Krajowe Laboratorium ds. Badania Skutków Zdrowotnych i Środowiskowych w USA.

W ramach bazy ECOTOX jest dostęp do baz danych obejmujących współczynniki narażenia dzikich zwierząt i informacje o toksyczności (Cal/Ecotox¹²) oraz progi graniczne narażeń ekotoksycznych (ET) dla wybranych chemikaliów wraz z oprogramowaniem je wyliczającym.

Risk Assessment Information System (RAIS)¹³ jest uznanym w świecie systemem baz danych stosowanym w analizach zagrożeń człowieka determinowanych przez zanieczyszczenie środowiska. RAIS obejmuje zintegrowany system informacji na temat ryzyka (IRIS)¹⁴, który powstał głównie w celu wspierania dwóch pierwszych kroków procesu oceny ryzyka, tj. identyfikacji zagrożeń i oceny reakcji na otrzymaną dawkę, oraz zestawienia danych z zakresu oceny skutków zdrowotnych (HEAST)¹⁵. Poprzez bazę RAIS można uzyskać dane dotyczące m.in.:

- 1) chronicznych i subchronicznych dawek referencyjnych;
- 2) współczynników nachyleń dla substancji rakotwórczych, wchłaniania z przewodu pokarmowego, przenikania przez skórę, akumulacji w rybach, suchego przejmowania przez rośliny (gleba/woda – tkanki roślin – na drodze suchej lub mokrej);
- 3) współczynników przejścia dla mleka (gleba/woda – krowa – mleko – człowiek) i współczynników lotności;
- 4) masy cząsteczkowej substancji chemicznych, stężeń nasycenia w glebie, stałej prawa Henry’ego i współczynników podziału (woda – węgiel organiczny i woda – oktanol).

3. WYKORZYSTANIE SWD-CHEM W PRAKTYCE

System komputerowy SWD-Chem, wspomagający zarządzanie zagrożeniami chemicznymi, oraz wyżej wymienione bazy danych stanowią narzędzia umożliwiające:

- 1) przygotowanie racjonalnych przesłanek kontroli zagrożeń chemicznych związanych z produkcją, przetwarzaniem, dystrybucją, składowaniem i stosowaniem chemikaliów;

¹² Opracowane przez Biuro Oceny Zagrożenia Zdrowia Środowiskowego (OEHHA) we współpracy z Centrum Informacji o Środowisku Uniwersytetu Kalifornijskiego.

¹³ Opracowany przez Krajowe Laboratorium Oak Ridge w USA.

¹⁴ Integral Risk Assessment System, opracowany i utrzymywany przez amerykańską Agencję Ochrony Środowiska.

¹⁵ Health Effects Assessment Summary. Tables – zbiór wszystkich dostępnych danych potrzebnych do oszacowania skutków zdrowotnych przygotowany i aktualizowany przez amerykańską Agencję Ochrony Środowiska.

- 2) wypełnianie postanowień krajowych przepisów prawnych, które są zharmozonizowane z wymaganiami Wspólnoty Europejskiej w zakresie zdrowia ludzi i ochrony środowiska, w tym m.in. stref jakości powietrza;
- 3) inwentaryzację punktowych, obszarowych i liniowych źródeł emisji;
- 4) diagnozowanie i prognozowanie rozkładów przestrzenno-czasowych emisji dla różnorodnych siatek czasowo-przestrzennych na poziomie lokalnym oraz w skali regionu i kraju w funkcji przyjętych strategii ograniczania skutków emisji;
- 5) dostarczanie argumentów w procesie negocjacji związanym z uzyskaniem zintegrowanego pozwolenia;
- 6) prognozowanie transportu skażeń w środowisku oraz ocenę ich skutków dla:
 - zdrowia człowieka,
 - ekosystemów wodnych,
 - ekosystemów lądowych,
 - jakości powietrza;
- 7) podejmowanie decyzji dotyczących środowiska przez dostarczanie informacji istotnych z punktu widzenia ochrony środowiska decydentom dla osób zarządzających ryzykiem o potencjalnych skutkach różnych decyzji zarządzania.

Osiągnięcie pełnej wersji operacyjnej systemu, przystosowanej do realizacji wymienionych zadań i umożliwiającej pełne wykorzystanie systemu w kraju wymaga dodatkowych działań, obejmujących:

- 1) dalsze udoskonalanie systemu i pełne jego dostosowanie do warunków krajowych w aspekcie rodzajów dostępnych danych wejściowych i ich formatu; dotyczy to w szczególności danych o źródłach emisji oraz numerycznego prognozowania pogody;
- 2) powiązanie SWD-Chem z systemem informacji przestrzennej (GIS);
- 3) opracowanie graficznych interfejsów użytkowników, uwzględniających ich preferencje.

W ramach promocji systemu SWD-Chem uruchomiono stronę www dedykowaną temu systemowi i jego potencjalnym zastosowaniom a także przeprowadzono serię seminariów roboczych dla potencjalnych użytkowników systemu w ramach pakietu roboczego dotyczącego modelowania transportu zanieczyszczeń w powietrzu i środowisku wodnym na potrzeby systemów wspomagania decyzji.

PIŚMIENNICTWO

- Borysiewicz M., Garanty I., Kozubal A., Furtek A., Jędrzejec H., Potemski S., Wasiuk A., Wojciechowicz H. 2005: Implementacja systemu modelowania emisji SMOKE, Raport IEA, B 28/2005.
- Borysiewicz M., Potemski S. 2005: Struktura i funkcje systemu wspomaganie decyzji w zakresie zagrożeń wynikających ze stałych emisji skażeń do atmosfery SWD-ES. Raport B-47/IEA/2005.
- Emissions and Air Quality Modeling—Phase I Task 2 Report. 2003: Recommended Model Configurations And Evaluation Methodology For Phase I Modeling. Prepared by: ENVIRON International Corporation, California 95616 Revised August 4.
- Borysiewicz M., Furtek A., Jędrzejec H., Potemski S., Wasiuk A., Wojciechowicz H. 2003: CMAQ – wieloskalowy model dla symulacji jakości powietrza, Raport A-103/IEA/2003.
- Borysiewicz M., Gałkowski A., Potemski S. 2003: MM5 – mezoskalowy model atmosfery ziemskiej. Implementacja systemu na klastrze obliczeniowym Beowulf w Instytucie Energii Atomowej, Raport A-102/IEA/2003.
- Borysiewicz M., Kacprzyk W., Żurek J. 2001: „Zintegrowane oceny ryzyka i zarządzanie zagrożeniami w obszarach przemysłowych” CIOP, Warszawa.
- Versar Inc. 1999: Environmental and Fate Assessment Screening Tool (E-FAST) Documentation Manual (Revised Draft Report. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, Office of Pollution Prevention and Toxics. EPA Contract No. 68-W-99-041. December 31.
- U.S. Environmental Protection Agency (EPA). 1989: Exposure Factors Handbook, Office of Health and Environmental Assessment, Washington D.C. EPA/600/8-89/043.
- Rizzoli A.E., Young W.J. 1997: Delivering Environmental Decision Support Systems: Software Tools and Techniques. *Environ. Modelling & Software*, 12, 237–249.
- U.S. Environmental Protection Agency. 1997: Policy for use of probabilistic analysis in risk assessment: guiding principles for Monte Carlo analysis. Washington, DC: Office of Research and Development.
- American Society for Testing and Materials. 1996: Standard terminology relating to biological effects and environmental fate. E943-95a. In: ASTM.
- U.S. Environmental Protection Agency. 1995: Proposed Guidelines for Ecological Risk Assessment. Risk Assessment Forum. EPA/630/R-95/002B.
- Cowan C.E., Versteeg D.J., Larson R.J., Kloepper-Sams P.J. 1995: Integrated approach for environmental assessment of new and existing substances. *Regul Toxicol Pharmacol* 21:3–31.
- Barbour M.T., Stribling J.B., Karr J.R. 1995: Multimetric approach for establishing biocriteria and measuring biological condition. In: Biological assessment and criteria, tools for water resource planning and decision making. Davis, W.S., Simon, T.P., eds. Boca Raton, FL: Lewis Publishers: 63–77.
- U.S. Environmental Protection Agency. 1993: Wildlife exposure factors handbook. Washington, DC: Office of Research and Development. EPA/600/R-93/187a and 187b.
- Cohrssen J., Covello V.T. 1989: Risk analysis: a guide to principles and methods for analyzing health and ecological risks. Washington, DC: Council on Environmental Quality.

<http://www.epa.gov/oppt/p2framework/docs/epiwin.htm>
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/docs/efast.htm>
<http://www.epa.gov/asmdnerl/Multimedia/MIMS/>
<http://www.dis.anl.gov/DIAS/>
<http://www.epa.gov/asmdnerl/CMAQ/CMAQscienceDoc.html>
<http://www.tiem.utk.edu/~sada/>
<http://www.osc.edu/hpc/computing/>
<http://www.epa.gov/ecotox/>
<http://risk.lsd.ornl.gov/>
<http://www.epa.gov/iris/>
<http://www.epa.gov/rpdweb00/heast/index.html>

Dr Mieczysław Borysiewicz, mgr Wanda Kacprzyk
Instytut Ochrony Środowiska, Zakład Polityki Ekologicznej
ul. Krucza 5/11, 00-548 Warszawa