Zastosowanie metod matematycznych w chemii i ochronie środowiska

Leszek Łajtar
Zakład Chemii Teoretycznej na Wydziale Chemii UMCS w Lublinie

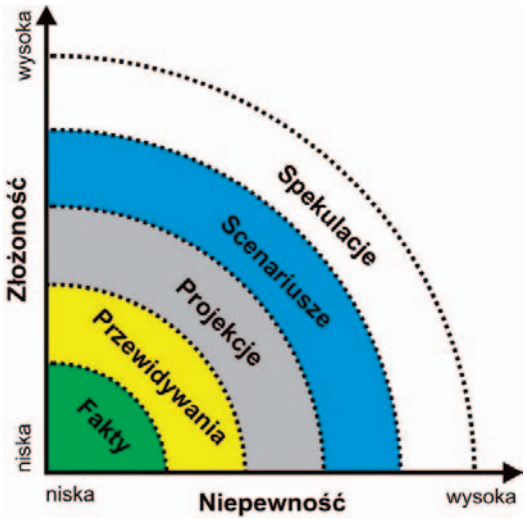
1. Wstęp

Znajomość podstaw matematyki ułatwia każdemu człowiekowi funkcjonowanie w codziennym życiu. Korzystamy z matematyki planując i dokonując zakupów, obliczając ile trzeba zapłacić przy określonej procentowo obniżce cen, obliczając raty, prowizję czy zysk, wybierając najbardziej korzystną ofertę w banku przy zakładaniu lokaty lub braniu kredytu oraz rozliczając dochody w urzędzie skarbowym. Rozpoczęcie własnej działalności gospodarczej również wymaga sprawności w obliczeniach potrzebnych przy prowadzeniu ksiąg rachunkowych, tj. obliczania przychodów i kosztów na podstawie faktur, obliczania różnego rodzaju podatków itp. Przy projektowaniu swojego domu lub ogrodu czy też planując remont, np. malowanie mieszkania, korzysta się z geometrii płaskiej i przestrzennej, aby obliczyć potrzebne ilości materiałów. Nauczanie matematyki kształci w nas takie cechy jak umiejętność analizowania, wyciągania wniosków, przewidywania, uogólniania i logicznego myślenia.

Matematyka ma również swoje niekwestionowane miejsce w niemal wszystkich współczesnych naukach, poczynając od nauk ścisłych i przyrodniczych poprzez medycynę, ekonomię, aż – co wydawać może się dziwne – do nauk humanistycznych. Modele i algorytmy matematyczne są wykorzystywane we wszystkich dziedzinach biologii i naukach medycznych. Bardzo często metody matematyczne (w tym modelowanie) wykorzystywane są przy projektowaniu procesów chemicznych oraz badaniu oddziaływań instalacji przemysłowych na środowisko i zdrowie człowieka. Bardzo duże znaczenie ma modelowanie zmian klimatycznych na ziemi, które są podstawą do przyszłych działań w zakresie zmian rozwoju gospodarki na świecie.

2. Modelowanie matematyczne – podstawy

Na model matematyczny rozważanego zjawiska składają się zwykle równania wyrażające zależności (stwierdzone doświadczalne) między wielkościami fizycznymi występującymi w badanym zjawisku. Pamiętać zawsze należy, iż model (oraz oparte na nim przewidywanie zjawisk, czyli modelowanie) zawsze opisuje rzeczywistość jedynie w sposób mniej lub bardziej przybliżony, przyjmując szereg założeń. Model jest również zawsze kompromisem pomiędzy jak najbliższym rzeczywistości opisem a względną prostotą i przejrzystością umożliwiającą jego weryfikację i praktyczne zastosowanie[1]. Z tego względu wyniki uzyskane na podstawie danego modelu należy interpretować z dużą ostrożnością. Ostrożność ta powinna wrastać wraz ze wzrostem złożoności modelowanego układu i niepewnością spowodowaną np. nieuwzględnieniem przez dany model wszystkich aspektów mających mieć wpływ na wynik modelowania. Brak ostrożności w interpretacji wyników modelowania (ale również pomiarów) może łatwo zamienić przewidywania w spekulacje (rys. 1).

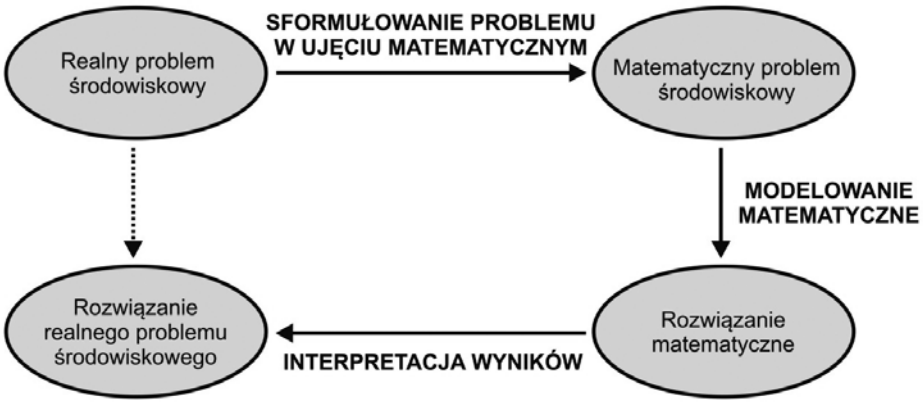


Rys. 1. Możliwość opisu zachowania się układów w zależności od stopnia złożoności układu i niepewności opisu [1]

[1] Uproszczanie obrazu rzeczywistości (czyli tworzenie modeli, których poprawność można było zweryfikować) rozpoczęło się dopiero w XVII-wiecznej Europie za sprawą naukowców takich jak Galileusz czy Kopernik.

Oczywiście nie jest możliwe uwzględnienie wszystkich czynników wpływających na to zjawisko. Uwzględnia się tylko te, których wpływ uważa się za dominujący. Model matematyczny badanego zjawiska opisuje je w sposób przybliżony, stąd też otrzymane wyniki także będą tylko przybliżone. Historia pokazuje, że doświadczenie – kryterium przydatności modelu, potwierdza zazwyczaj nowe związki między wielkościami fizycznymi oraz zjawiska sugerowane przez model. Z tego względu modelowanie stanowi bardzo przydatne narzędzie badawcze i obecnie spotykać można się z nim we wszystkich dziedzinach nauki. Warto podkreślić, iż wielce zaskakującą i niezwykłą rzeczą jest „niezrozumiała skuteczność" modeli matematycznych w naukach przyrodniczych, w tym również ochronie środowiska [2].

Modelowanie matematyczne umożliwia rozwiązywanie problemów, których nie można zbadać doświadczalnie, gdyż są zbyt trudne, niebezpieczne, kosztowne lub też zbyt złożone do analizy teoretycznej [3]. Podstawowym zadaniem modelowania matematycznego jest symulacja złożonych zjawisk fizycznych występujących w środowisku naturalnym. Odbywa się to poprzez rozwiązanie właściwego układu równań matematycznych, wyprowadzonych na podstawie konkretnego fizycznyego modelu danego układu. Modelowanie matematyczne umożliwia przekształcenie modelu ciągłego (opisanego np. układem równań różniczkowych zwyczajnych lub cząstkowych) w formę nieciągłą (zwaną też dyskretną), którą można rozwiązać numerycznie, poprzez użycie odpowiednich algorytmów.



Rys. 2. Koncepcja modelowania matematycznego jako klucza do rozwiązania konkretnego problemu

Zastosowanie numerycznych symulacji do matematycznego modelowania zjawisk zachodzących w środowisku naturalnym oraz możliwość ich kon-

frontacji z metodami doświadczalnymi jest coraz cenniejszym naukowym orężem, jakie posiada współczesna nauka. Coraz szybszy rozwój metod modelowania matematycznego jest ściśle związany ze wzrostem mocy obliczeniowej komputerów oraz pojemności dysków niezbędnych do przechowywania ogromnych ilości danych [2]. Rozwój ten pozwala na coraz dokładniejszy opis właściwości i zachowań rozważanych układów, nie tylko w sposób jakościowy, ale również ilościowy. Zaletą modelowania matematycznego jest to, że symulację można wielokrotnie powtarzać, zmieniając każdorazowo parametry, oraz obserwować i analizować wpływ wprowadzonych zmian na przebieg analizowanego zjawiska.

W ciągu ostatnich kilku dekad opracowano i skutecznie zastosowano wiele modeli służących do prognozowania zmian środowiskowych. Modelowanie stało się niezwykle ważnym fundamentem oceny środowiskowej, odgrywając kluczową rolę w dostarczaniu danych i wskaźników potrzebnych do opisania stanu środowiska naturalnego zarówno w chwili obecnej, jak i w przyszłości.

3. Przykłady zastosowania modelowania matematycznego w chemii i ochronie środowiska

3.1. Projektowanie procesów chemicznych

Pakiet programów CHEMCAD firmy Chemstations Inc. należy do nowoczesnych programów stosowanych w Komputerowo Wspomaganej Inżynierii Procesowej (Computer Aided Chemical Engineering) zwanych symulatorami procesów przemysłowych znajdujących zastosowanie w przemyśle naftowym i gazowym, petrochemii, biopaliw i produkcji chemikaliów (w tym w przemyśle farmaceutycznym). ChemCad pozwala na modelowanie ponad 95% zadań technologicznych spotykanych w przemyśle chemicznym [3]. W skład CHEMCADA wchodzą następujące moduły:

1. CC-STEADY STATE – główny składnik Chemcada, służy do projektowania i wyznaczania szybkości oraz optymalizacji procesów w warunkach równowagowych.
2. CC DYNAMICS – służy do projektowania i wyznaczania szybkości procesów zmiennych w czasie (dynamicznych). Moduł ten jest całkowicie zintegrowany z pozostałymi elementami CHEMCADA, co pozwala na łatwe przełączanie z warunków dynamicznych na równowagowe i na odwrót.
3. CC BATCH – przeznaczony do projektowania i wyznaczania szybkości i optymalizacji kolumny destylacyjnej periodycznej.

4. CC THERM – służy do symulacji pojedynczej wymienników ciepła płaszczowych, płytowych i rurowych.

5. CC SAFETY NET – przeznaczony do symulacji sieci przesyłowych (rur), systemów bezpieczeństwa pracujących zarówno w trybie równowagowym jak i dynamicznym.

6. CC FLASH – zawiera bazy danych fizykochemicznych substancji i równowag fazowych oraz pozwala na estymacje właściwości fizykochemicznych układów i ich regresje. CC FLASH jest częścią CC-STEADY STATE i przeznaczony jest dla użytkowników mniej zaznajomionych z symulatorami procesowymi.

Oprogramowanie CHEMCAD znalazło swoje zastosowanie zarówno przy nieskomplikowanych procesach nieciągłych, jak i przy zaawansowanych instalacjach przemysłowych pracujących w sposób ciągły. Producent pakietu oprogramowania szacuje, że CHEMCAD używany jest obecnie przez ponad 400 czołowych firm na świecie jako podstawowe oprogramowanie do modelowania procesów. Obliczenia symulacyjne przy użyciu CHAMCADA można prowadzić przy rozwiązywaniu różnego rodzaju problemów technologicznych dla takich procesów i operacji jak: destylacja, ekstrakcja, wymiana ciepła, elektroliza i inne [4].

3.2. Modelowanie zagrożeń przemysłowych

Istotnym z punktu widzenia bezpieczeństwa chemicznego jest prawidłowy nadzór nad instalacjami przemysłowymi, które mogą powodować wiele zagrożeń związanych z występowaniem awarii. Program ALOHA jest przykładem zastosowania modelu matematycznego do oszacowania stref zagrożenia w przypadku awaryjnego uwolnienia substancji niebezpiecznych. Aplikacja ALOHA została stworzona przez National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) oraz U.S. Environmental Protection Agency (EPA). Aplikację można bezpłatnie pobrać ze strony Environmental Protection Agency [5].

W jednej z prac dokonano analizy potencjalnych zagrożeń w zakładach mleczarskich wykorzystujących w swoich procesach technologicznych amoniak. Istotnym zagrożeniem wynikającym z właściwości fizykochemicznych jest jego przechowywanie w dużych ilościach. Przy ewentualnym rozszczelnieniu zbiornika może dojść do skażenia środowiska, co zagroziłoby zdrowiu i życiu pracowników oraz mieszkańców obszarów przyległych do zakładu. W prezentowanych badaniach wyznaczono strefy zagrożeń powodowanych użyciem amoniaku w warunkach rzeczywistych oraz przeprowadzono badania prognostyczne. Analiza przeprowadzonych pomiarów chmury amoniakalnej w warunkach rzeczywistych i modelowania zagrożeń z wykorzystaniem programu kompu-

terowego ALOHA wykazała, że zobrazowane zasięgi stref zagrożeń pokrywają się z wartościami stref, które zostały wyznaczone przez przyrządy pomiarowe w warunkach rzeczywistych. Tego rodzaju badania prognostyczne mogą pozwolić na ograniczenie zagrożeń a nawet na wyeliminowanie awarii [6].

3.3. Ochrona powietrza

Zastosowanie metod matematycznych w ochronie środowiska ma już swoją kilkudziesięcioletnią historię i obejmuje wiele tematów zarówno o charakterze bardzo podstawowym, jak i stosowanym. Opierając się na równaniach matematycznych opracowano wiele modeli rozprzestrzeniania zanieczyszczeń w atmosferze. Stosuje się je powszechnie do oceny aktualnej jakości powietrza (modele diagnostyczne), ale przede wszystkim znalazły zastosowanie do prognozowania stężeń imisyjnych dla obiektów projektowanych (modele prognostyczne). Z uwagi na koszty prowadzenia pomiarów modelowanie matematyczne rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń stale nabiera coraz większego znaczenia. Modelowanie znajduje zastosowanie przy określaniu miejsca pod przyszłe źródła zanieczyszczeń (nowe zakłady) i w planowaniu zabudowy miejskiej w celu minimalizacji wpływu zanieczyszczeń na środowisko naturalne i zdrowie człowieka.

Modele matematyczne prognozy stężeń zanieczyszczeń można podzielić na dwa rodzaje: statystyczne oraz deterministyczne. W pierwszych wykorzystywane są wyniki pomiarów zanieczyszczeń w celu wyznaczenia semiempirycznych relacji receptor-źródło zanieczyszczeń. Przykładem modelu statystycznego jest krótkoterminowa prognoza stężenia zanieczyszczeń na podstawie danych z monitoringu zanieczyszczeń. W modelach deterministycznych obliczenia rozpraszania zanieczyszczeń rozpoczyna się od punktu emisji, a następnie ustala się zależności przyczynowo-skutkowe typu emitor-receptor. Przykładem modelu jest model transportu i dyfuzji zanieczyszczeń w atmosferze, gdzie obliczenia stężeń zanieczyszczeń są przeprowadzane za pomocą równań i wzorów teoretycznych [7].

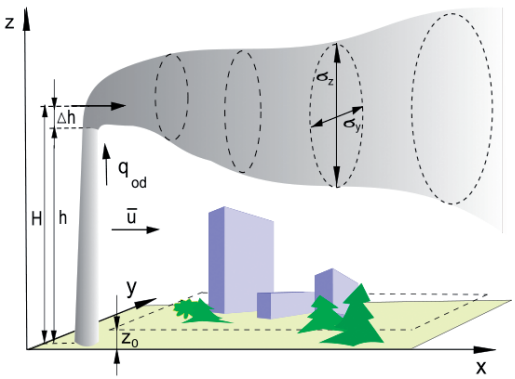
Modele rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń różnią się między sobą zarówno strukturą matematyczną, skalą czasową, obszarem zastosowań oraz rodzajem, liczbą i jakością wprowadzanych danych. Wszystkie modele stanowią jednak tylko pewne przybliżenie zjawisk fizykochemicznych, jakie zachodzą w atmosferze. Mają one wiele zalet, jednak nie są pozbawione uchybień i wad. Pierwszą i zasadniczą wadą jest w przypadku większości modeli nadal zbyt niski stopień zgodności wyników obliczeń z wynikami pomiarów terenowych. Głównym powodem jest to, że zjawisko rozpraszania zanieczyszczeń jest bardzo złożone i nie poddaje się prostemu opisowi matematyczne-

mu. Wśród specjalistów panuje zgodna opinia, że żaden z dotychczas stworzonych modeli nie jest ani uniwersalny, ani w pełni niezawodny i dlatego korzystanie z dostępnych metod obliczeniowych, a tym bardziej z gotowych programów komputerowych, wymaga głębokiej znajomości tematu.

Modele deterministyczne rozprzestrzeniania zanieczyszczeń w atmosferze można opisać za pomocą różniczkowych modeli Eulera, całkowych modeli Lagrange'a, oraz modeli Gaussa. Już w latach 30. XX wieku jeden z najwybitniejszych brytyjskich fizyków Sir Geoffrey Ingram Taylor próbował zastosować wiedzę z dziedziny dynamiki płynów do przewidywania rozprzestrzeniania się dymów oraz gazów z kominów i innych źródeł przemysłowych, co pozwalałoby ocenić oddziaływanie tych substancji na środowisko. Jego prace dały początek wielu modelom matematycznym używanym obecnie do modelowania rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w atmosferze. Modele te można z grubsza podzielić na dwie grupy:

1. Modele opisujące zanieczyszczenie atmosfery ze źródeł punktowych (np. kominy). Modele te mogą być rozszerzone również do opisu emisji ze źródeł liniowych i powierzchniowych.

2. Modele opisujące globalne zanieczyszczenie atmosfery, tzw. gaussowski „model smugi odorantów" (z ang. *gausian plume model*), gdzie stosuje się różniczkowe równanie Pasquille'a opisujące zależność stężenia zanieczyszczeń w danym punkcie od szeregu parametrów (patrz rys. 3).



$$C_{od,\,xyz} = \frac{q_{od}}{2\pi\,\bar{u}\,\sigma_y\sigma_z}\exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]\left\{\exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right]+\exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right]\right\}$$

$$\sigma_y = A\,x^a \qquad A = 0{,}08\,(6\,m^{-0{,}3} + 1 - \ln\frac{H}{z_o}) \qquad a = 0{,}367\,(2{,}5 - m)$$

$$\sigma_z = B\,x^b \qquad B = 0{,}38^{1{,}3}(8{,}7 - \ln\frac{H}{z_o}) \qquad b = 1{,}55\exp(-2{,}35\,m)$$

Rys. 3. Modelowanie zanieczyszczenia atmosfery przy użyciu różniczkowego równania Pasquille'a ($C_{od,xyx}$ – stężenie zanieczyszczenia w punkcie (x, y, z) [8]

Jak więc widać – nawet na przykładzie powyższego, relatywnie prostego modelu – u podstaw każdej metody modelowania leżą mniej lub bardziej skomplikowane zależności matematyczne. Najczęściej mają one postać układu równań różniczkowych zwyczajnych, różniczkowych cząstkowych, całkowych, różnicowych czy algebraicznych lub ich kombinacji. Kluczowa jest zatem rola posiadania dobrze utrwalonej wiedzy matematycznej, tak aby eksperymentowanie na matematycznym modelu rzeczywistości było jak najbardziej efektywne.

3.4. Wykorzystanie modelowania LCA w gospodarce odpadami

Przykładem zastosowania modelowania matematycznego w ochronie środowiska jest ocena systemów gospodarki odpadami komunalnymi. Wykorzystuje się w tej ocenie szereg programów przygotowanych z myślą o optymalizacji systemów. Jednym z takich programów jest program IWM-PL (Integreated Waste Management), który jest stosowany do modelowania Analizy Cyklu Życia (LCA) w systemie gospodarki odpadami.

Program ten wspomaga podejmowanie decyzji o inwestycjach związanych z gospodarką odpadami komunalnymi. Wykorzystuje ideę oceny cyklu życia (LCA) jako zalecaną w Unii Europejskiej technikę zarządzania środowiskiem. Metodyka LCA wykorzystana jest w tym programie zwłaszcza do oceny działań w zakresie gospodarki odpadami komunalnymi. Program IWM-PL jest pierwszą dostępną w języku polskim aplikacją, bazującą i modyfikującą programy komputerowe, tj. IWM-2 czy SimaPro. Pozwala on opracować model zarówno dla gospodarki odpadami w wybranym regionie, jak i dla składowania odpadów, spalania, MBP, transportu oraz recyklingu i na tej podstawie określić ich wpływ na środowisko [9].

W programie tym możliwe jest również modelowanie kilku scenariuszy gospodarki odpadami komunalnymi z wykorzystaniem różnych technologii ich unieszkodliwiania lub przetwarzania. Dane są zestawiane w jedną spójną całość i prezentowane na wykresach Sankeya [9]. Program zawiera dwa główne moduły: ocenę środowiskową oraz analizę ekonomiczną, które dla różnych rozwiązań będą uwzględniane przy modelowaniu.

Celem programu jest modelowanie i ocena potencjalnych wpływów na środowisko planowanych lub stosowanych rozwiązań w gospodarce odpadami. Ocena ekologiczna systemu gospodarki odpadami komunalnymi w tym programie pozwala określić jego wpływ na środowisko z uwzględnieniem szeregu operacji takich jak: sortowanie odpadów, kompostowanie, proces biologiczno-mechanicznego przetwarzania, proces termicznego przekształcania, składowanie odpadów oraz ich transport.

Jednostką funkcjonalną w tym modelu jest całkowita ilość odpadów wprowadzonych do systemu, dzięki czemu można porównać ze sobą różne scenariusze dla danego regionu lub miasta.

W fazie analizy zbioru dokonuje się inwentaryzacji wszystkich wejść i wyjść do systemu (w tym przypadku systemu gospodarki odpadami), czyli pobranych ze środowiska zasobów, uwolnionych do środowiska emisji, energii, użytecznych produktów itp. W fazie tej należy zebrać, obliczyć odpowiednią ilość danych i poprawnie wprowadzić je do modelu.

- Zbiórka odpadów – na samym początku należy wprowadzić ilość zmieszanych odpadów komunalnych oraz ich skład morfologiczny (papier, szkło, tworzywa sztuczne, tekstylia oraz odpady organiczne). Następnie trzeba wprowadzić dane na temat zbiórki odpadów wielkogabarytowych (szkło, metale żelazne i nieżelazne, tworzywa sztuczne miękkie i twarde, inne). Kolejne dwa kroki dotyczą odpadów selektywnie zbieranych, powinno się tu wprowadzić ilość odpadów zebranych w pojemnikach indywidualnych (dzwonach) oraz ilość odpadów zebranych w pojemnikach wspólnych.
- Sortowanie.
- Przetwarzanie odpadów (proces produkcji paliwa RDF, termiczne przetwarzanie, biologiczne przetwarzanie oraz składowanie odpadów) [10].

Następnie model IWM-PL, po wprowadzeniu poprawnych danych, pozwala obliczyć emisję do wody i do powietrza. W metodyce tej rozpatruje się trzy kategorie szkody dla:

- zdrowia ludzi;
- jakości ekosystemu;
- zasobów naturalnych.

W modelu tym nie uwzględniono kategorii szkody: zasoby naturalne. Emisje do powietrza i do wody, są przekształcane w sześć kategorii wpływu:

- czynniki rakotwórcze;
- układ oddechowy – związki nieorganiczne;
- układ oddechowy – związki organiczne;
- zmiana klimatu;
- zakwaszenie/eutrofizacja;
- ekotoksyczność.

Innymi programami, które są stosowane do oceny cyklu życia w gospodarce odpadami są:

- IWM-2 – narzędzie programowe, które pozwala na utworzenie modelu gospodarki odpadami komunalnych. Jednak najczęściej ocena prowadzona jest dla kilku kategorii wpływu.

- ORWARE – model do badań odpadów organicznych, umożliwia prowadzenia analiz środowiskowych systemów gospodarki odpadami komunalnymi.
- WISARD – oprogramowanie wspomagające ocenę alternatywnych scenariuszy gospodarki odpadami. Wszystkie scenariusze są automatycznie sprawdzane pod kątem zgodności i zawierają wytyczne w przypadku wystąpienia problemów.
- WRATE – to uproszczone oprogramowanie wykorzystujące technikę LCA, umożliwiające modelowanie potencjalnych skutków (obecnych i przyszłych) i wpływów odpadów na środowisko.
- EASEWASTE – narzędzie do oceny cyklu życia stosowane w zarządzaniu odpadami, oblicza przepływy masy, zużycie surowców oraz odzyskane materiały, jak również wszystkie emisje do ziemi, wody i powietrza. Emisje są sumowane do kategorii wpływu.
- LCA-LAND – oprogramowanie dla składowisk i spalarni odpadów [10].

3.5. Ochrona przed hałasem

Istotnym problemem środowiskowym jest hałas, z którym spotykamy się każdego dnia. W celu określenia zagrożeń dla zdrowia ludzi i środowiska powodowanych hałasem pochodzącym z tras komunikacyjnych wykorzystuje się, oprócz urządzeń pomiarowych, również wiele programów komputerowych wykorzystujących modelowanie. Jednym z takich programów jest Program Traffic Noise, który służy do prognozowania rozprzestrzeniania się hałasu poprzez model zgodny z obowiązującymi normami i dyrektywami. Opiera się na tzw. tymczasowym modelu obliczeniowym zgodnym z francuską krajową metodą obliczeniową „NMPB-Routes-96", do której odnosi się francuska norma „XPS 31-133". Metodyka ta jest zalecaną w Dyrektywie 2002/49/EU do stosowania w krajach członkowskich UE tymczasową metodyką modelowania hałasu drogowego. Prognozowanie imisji hałasu w sieci punktów recepcyjnych odbywa się na podstawie znajomości parametrów geometrycznych źródeł oraz ich mocy akustycznej określonej w sposób teoretyczny na podstawie danych charakteryzujących odcinek drogi zgodnie z cytowaną metodą obliczeniową [11].

W przyjętym modelu można wprowadzić odcinki dróg z podziałem na kierunek ruchu. Program – w zależności od wybranej przez użytkownika opcji obliczeń – albo dzieli odcinek na odcinki równej długości, albo sam decyduje o sposobie podziału odcinka na odcinki mniejsze (zastępując je źródłami punktowymi) w zależności od jego lokalizacji w stosunku do punktu

obserwacji. Program wyposażono w wiele funkcji ułatwiających użytkownikowi jego prawidłową i nieskomplikowaną obsługę. Wyniki działania programu mogą być zapisane do pliku jako wypadkowe poziomy w punktach obserwacji lub przedstawione przy pomocy mapy akustycznej (barwnych plam) lub izolinii [11].

3.6. Modelowanie zmian klimatycznych

W ostatnich dekadach XX oraz pierwszej dekadzie XXI wieku z wielu problemów środowiskowych na pierwszy plan wysuwa się problem tzw. globalnego ocieplenia. Kluczowym zagadnieniem jest w tym zakresie przygotowanie wiarygodnych prognoz zmian klimatu. Narzędziem służącym do tego celu są modele matematyczne systemu klimatycznego zwane w skrócie GCM (Global Circulation Model) lub ostatnio GEM (Global Environmental Model). Jest to model numeryczny opisujący atmosferę, ocean i procesy geochemiczne w przyrodzie. Efektem obliczeń wykonywanych za pomocą tych modeli są zarówno serie czasowe parametrów klimatycznych, jak i mapy ich rozkładu przestrzennego. W 1983 r. Amerykańskie Centrum Badań Atmosfery (US National Center for Atmospheric Research – NCAR) stworzyło pierwszy Wspólny Model Klimatu (Community Climate Model – CCM). Umożliwienie wolnego dostępu do kodów źródłowych pozwoliło uczestniczyć w badaniach nad jego udoskonalaniem naukowcom, reprezentującym różne dyscypliny naukowe z całego świata [12, 13].

Globalny model klimatu jest oparty na podstawowych prawach fizyki, chemii, oraz opisie przepływu cieczy, jakimi są powietrze i woda. W ogólnych modelach klimatu atmosfera jest zdyskretyzowana trójwymiarową siatką punktów, na których rozwiązywane są równania ruchu i opisywane procesy fizyczne. Wyniki z modelu są analizowane metodami graficznymi i statystycznymi. Model atmosferyczny pozwala obliczyć takie wielkości jak prędkość i kierunek wiatru, przepływ ciepła, procesy radiacyjne w atmosferze, rozkład wilgotności, hydrologia na powierzchni Ziemi. Globalny model klimatu (GCM) opisuje atmosferę i oceany planety na podstawie rozwiązania równań Naviera Stokesa na obracającej się sferze. Jest to model numeryczny opisujący zachowanie się klimatu na podstawie równań mechaniki płynów oraz innych równań fizyki i chemii opisujących procesy istotne z punktu widzenia zmian klimatu [12, 13, 14].

Równania te tworzą złożony system numeryczny, który jest rozwiązywany zazwyczaj za pomocą symulacji komputerowych. Globalne modele atmosfery (AGCM) i oceanu (OGCM) są głównymi składnikami globalnego modelu

klimatu. Połączone razem noszą nazwę atmosferyczno-oceanicznego globalnego modelu klimatu (AOGCM). W latach 2007–2013 rozwijane są także globalne modele całej Ziemi (Earth System Models), które uwzględniają obieg węgla w atmosferze i oceanie, czyli procesy geochemiczne. Globalne modele klimatu uwzględniają także pokrywę lodową oraz procesy na powierzchni lądów. Modele ogólnej cyrkulacji atmosfery są rozszerzane o moduły uwzględniające chemię atmosfery czy cykl obiegu węgla i nazywane są wtedy modelami systemu Ziemia. Modele takie lepiej opisują emisję gazów cieplarnianych i dają możliwość uwzględnienia różnego rodzaju sprzężeń zwrotnych. Połączone modele klimatu zawierające chemię atmosfery pozwalają na przykład na lepszy opis zachowania dziury ozonowej [12, 14].

4. Podsumowanie

Modelowanie matematyczne dzięki kompleksowej ocenie procesów zachodzących zarówno w instalacjach chemicznych czy w środowisku jest najlepszym (i często jedynym) narzędziem umożliwiającym ocenę stopnia zanieczyszczenia środowiska naturalnego oraz prognozowanie ryzyka związanego ze szkodliwym oddziaływaniem substancji je zanieczyszczających. Istotnym zastosowaniem modelowania matematycznego jest jego wykorzystanie do poszerzenia zakresu dostępnej informacji gromadzonej w procesie rozpoznawania i oceny warunków panujących w środowisku przyrodniczym. Pełne zrozumienia istoty oraz ograniczeń modelowania matematycznego wymaga posiadania pewnej wprawy w posługiwaniu się matematyką, a rzetelne przyswojenie wiedzy matematycznej na początkowych latach studiów będzie dla studentów niewątpliwym atutem w późniejszym okresie ich edukacji, związanym z implementacją zdobytej wiedzy do skutecznego posługiwania sią narzędziami modelowania matematycznego w ochronie środowiska czy chemii.

5. Bibliografia

1. Żurek M.B., Henrichs T.: Linking scenarios across geographical scales in international environmental assessments, Technological Forecasting & Social Change 2007; 74: 1282–1295.
2. Winger E.: The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences, Communications in Pure and Applied Mathematics 1960; 13: 1–14.
3. www2.epa.gov/cameo/aloha-software
4. www.chemstations.com

5. Kaim A.: Symulacja komputerowa procesów technologicznych programem CHEMCAD. Materiały ćwiczeniowe z Zakładu Dydaktycznego Technologii Chemicznej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego.
6. Rogalewicz G., Bajdur W.M.: Modelowanie zagrożeń przemysłowych na przykładzie substancji chemicznej amoniaku. Prace Naukowe Akademii im. Jana Długosza w Częstochowie. Technika, Informatyka, Inżynieria Bezpieczeństwa 2014, t. II, s. 325–336.
7. Michalczyk J.K.: Transport gazowych zanieczyszczeń w powietrzu – symulacje numeryczne w skali lokalnej. Rozprawa doktorska, Politechnika Lubelska, Instytut Inżynierii Ochrony Środowiska, Lublin 2003.
8. Rysunek zamieszczono na mocy licencji Wikimedia Commons (Autorka: Joanna Kośmider) ze strony internetowej: http://pl.wikibooks.org/wiki/. Plik: Smuga_Gaussa.svg.
9. Kraszewski A., Pietrzyk-Sokulska E.: Ocena Systemu Gospodarki Odpadami. Praktyczne zastosowania. Wyd. IGSMiE PAN, Kraków 2011.
10. www.soft-p.com.pl
11. www.pl.wikipedia.org
12. Stach A.: GIS w globalnych i regionalnych modelach klimatycznych, prezentacja multimedialna. Instytut Paleogeografii i Geoekologii Uniwerystetu Adama Mickiewicza w Poznaniu.
13. www.pogody.pl