



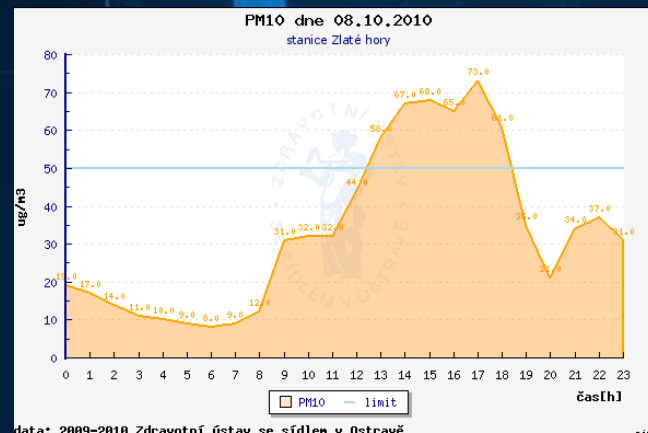
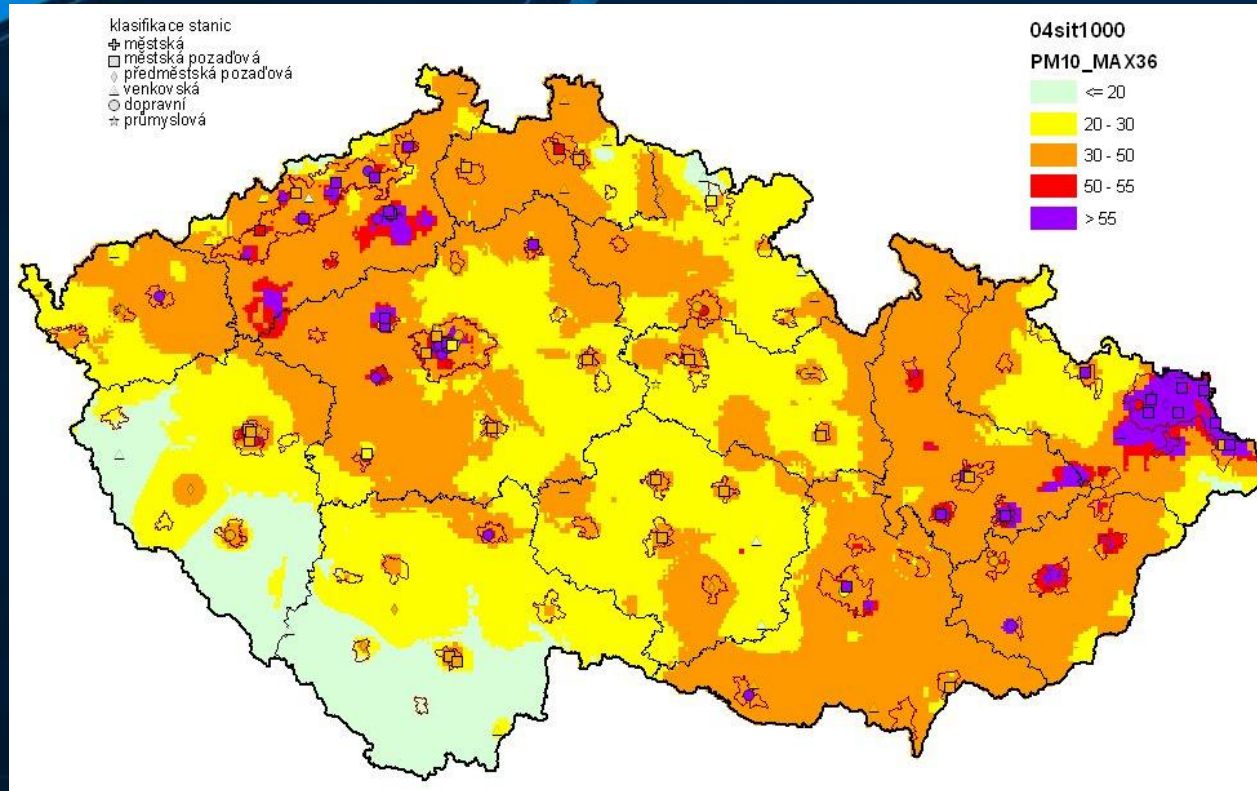
CENTRUM
DOPRAVNÍHO
VÝZKUMU

Znečištění ovzduší na lokalitách významně zatížených dopravou

Jiří Huzlík

Proč znečištění z dopravy?

Nebezpečnost PM nespočívá jen v jejich mechanických vlastnostech, ale především v obsahu celé řady rizikových organických nebo anorganických škodlivin.



Model faktorové analýzy

$$Y_j = \sum_{k=1}^m \lambda_{jk} F_k + E_j, j = 1, \dots, p$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{F} + \mathbf{E}$$

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_p \end{pmatrix}$$

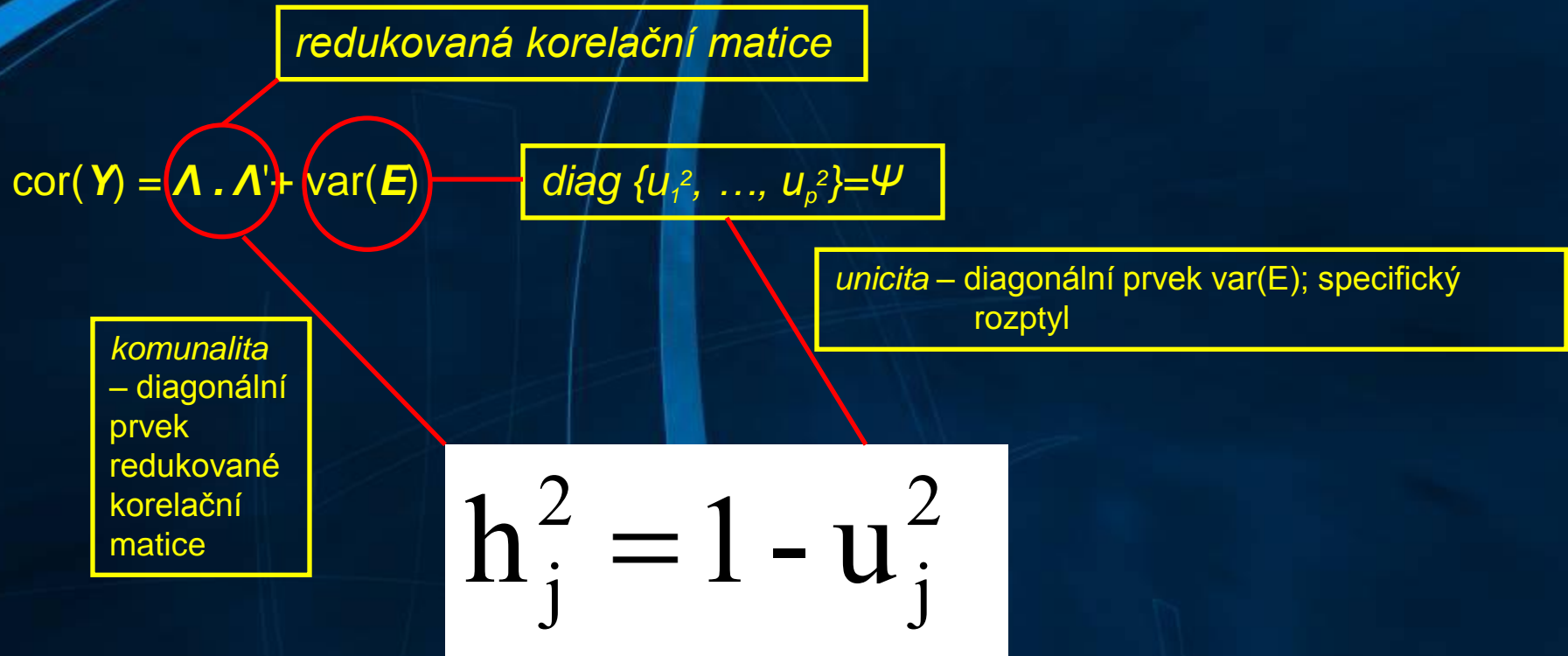
$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \dots & \lambda_{1m} \\ \dots & \dots & \dots \\ \lambda_{p1} & \dots & \lambda_{pm} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} F_1 \\ \vdots \\ F_m \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_1 \\ \vdots \\ E_p \end{pmatrix}$$

- náhodné vektory \mathbf{F} a \mathbf{E} jsou nekorelované
- $\text{var}(\mathbf{E}) = \text{diag} \{u_1^2, \dots, u_p^2\}$ (tj. náhodné odchylky jsou nekorelované),
- $\text{var}(\mathbf{F}) = \mathbf{I}$, kde \mathbf{I} je jednotková matice řádu m (tj. faktory jsou nekorelované a mají jednotkové rozptyly).

Komunalita a unicity



Komunalita h_j^2 veličiny Y_j udává část rozptylu této veličiny, která je vysvětlena působením společných faktorů

Vhodnost použití FA

Kvantitativní vyjádření toho, zda korelace mezi veličinami Y jsou vysvětlitelné pomocí jiných veličin F- Kaiser-Meyer-Olkinova míra:

$$KMO = \frac{\sum_{i \neq j}^p \sum_{j \neq i}^p r_{ij}^2}{\sum_{i \neq j}^p \sum_{j \neq i}^p r_{ij}^2 + \sum_{i \neq j}^p \sum_{j \neq i}^p a_{ij}^2} \geq 0.5$$

r_{ij} korelační koeficienty
 a_{ij} parciální korelační koeficienty

Zjišťujeme na n objektech realizujících p veličin Y

Bartlettův test sféricity

$$\chi^2 = \frac{11 + 2m - 6n}{6} \ln |\mathbf{R}|$$

Když $\chi^2 \geq \chi_{1-\alpha}^2 \left(n(m-1)/2 \right) \Rightarrow p < \alpha$ a nulovou hypotézu zamítáme.

Volba počtu společných faktorů

- Kaiserovo kritérium - za m zvolíme počet vlastních čísel korelační matice větších než 1.
- Graf úpatí vlastních čísel (scree test) – subjektivní posouzení vzhledu grafu (scree plot) znázorňujícího velikosti sestupně uspořádaných vlastních čísel matice R . Objeví-li se v grafu zploštění, pak za m vezmeme to pořadové číslo hlavní komponenty, kde se zploštění projevilo.
- Kritérium založené na součtu prvních m největších vlastních čísel matice $R \approx p$, tj. aby byl podíl celkového rozptylu pozorovaných veličin dostatečně vysvětlen příslušným faktorovým modelem.
- Kritérium založené na reziduální korelační matici B po extrakci m společných faktorů požadujeme, aby všechny mimodiagonální prvky reziduální korelační matice B_{ij} byly např. v absolutní hodnotě menší než 0.1.

$$\mathbf{B} = \mathbf{R} - \widehat{\Lambda}\widehat{\Lambda}' - \widehat{\Psi}$$

Rotace faktorové matice

$$\Lambda \Lambda' = \text{var}(\mathbf{Y}) - \text{var}(\mathbf{E})$$

$$\text{kde } \text{var}(X) = E(X^2) - [E(X)]^2$$

$$\text{Když } \mathbf{U}\mathbf{U}' = \mathbf{I} \text{ a } \Lambda^* = \Lambda\mathbf{U} \Rightarrow \Lambda^* \Lambda^{*'} = \text{var}(\mathbf{Y}) - \text{var}(\mathbf{E})$$

Absolutní komponentní skóre

Bartlettova metoda vážených nejmenších čtverců

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{A}' \cdot \hat{\Psi}^{-1} \cdot \hat{\Lambda}^{-1} \cdot \hat{\Lambda}' \cdot \hat{\Psi}^{-1} \cdot \mathbf{Y}'_i$$

$$\epsilon_{0j} = -\frac{\bar{X}_j}{s_j}$$

$$\mathbf{F}_0 = \mathbf{A}' \cdot \hat{\Psi}^{-1} \cdot \hat{\Lambda}^{-1} \cdot \hat{\Lambda}' \cdot \hat{\Psi}^{-1} \cdot \mathbf{Y}'_0$$

$$\mathbf{APCS} = \mathbf{F} - \mathbf{F}_0$$

Vícerozměrná lineární regrese

- Model: $PM \sim APCS$
- Testy významnosti jednotlivých regresních koeficientů
- Příspěvek faktoru k celkové koncentraci PM:
- $PM_k = b_k \cdot APCS_k$
- Průměr APCS celkem, za lokalitu; hodnota za jedno měření

Experimentální část

Přehled stanovovaných prvků (Akce 2 označena *)

Li	Na*	Mg*	Al	K*	Ca*	Ti	V*	Cr*	Mn*	Fe	Co	Ni*	Cu*	Zn*	Ga	As*	Se	Rb
Sr	Mo*	Rh	Pd	Ag	Cd*	Sn*	Sb*	Ba*	La	Ir	Pt	Hg	Tl	Pb*	Bi	U	PM	

Přehled stanovovaných PAU Akce 2

Fla	Py	BaA	Chry	BbF	BkF	BeP	BaP	IPy	BghiPe	Cor
-----	----	-----	------	-----	-----	-----	-----	-----	--------	-----

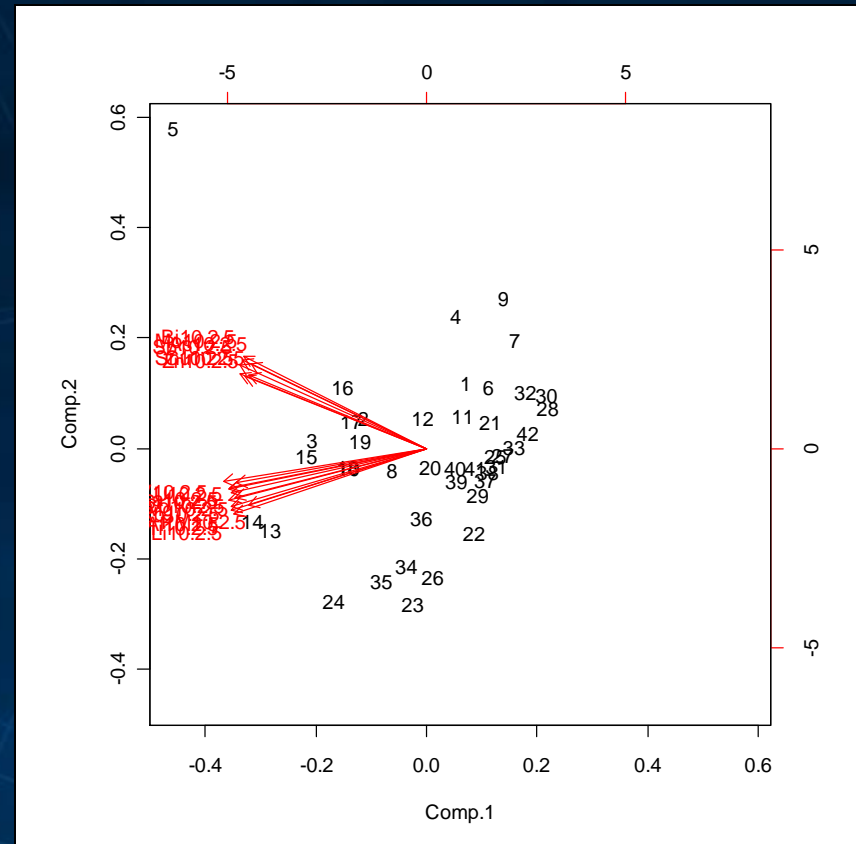
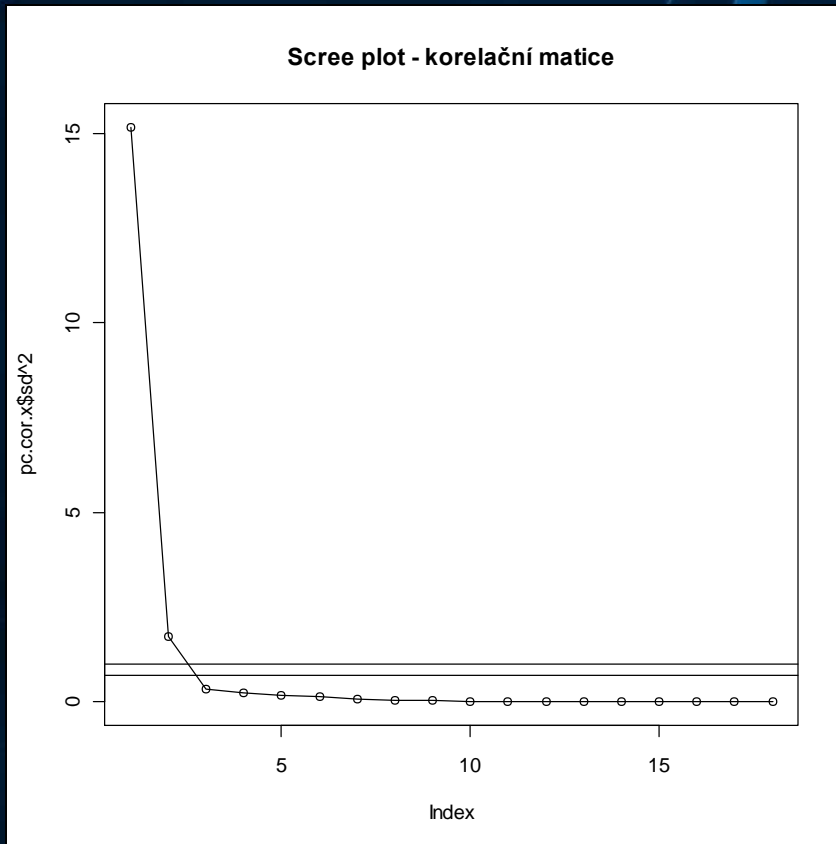
Date start	Date end	Campaign	Action	PM
4.9.2006	10.9.2006	1	3	2.5, 1
6.11.2006	12.11.2006	2	3	10, 2.5, 1
7.3.2007	13.3.2007	3	3	10, 2.5, 1
16.4.2007	22.4.2007	1	2	1
23.4.2007	29.4.2007	4	3	10, 2.5, 1
28.5.2007	3.6.2007	2	2	1
9.7.2007	15.7.2007	3	2	1
21.8.2007	27.8.2007	4	2	1
1.10.2007	7.10.2007	5	2	1
19.11.2007	25.11.2007	6	2	1
14.1.2008	20.1.2008	7	2	1
25.2.2008	2.3.2008	8	2	1

Diagnostické grafy - PCA

Script

Graf vlastních čísel pro $PM_{10-2.5}$

Dvojný graf pro $PM_{10-2.5}$



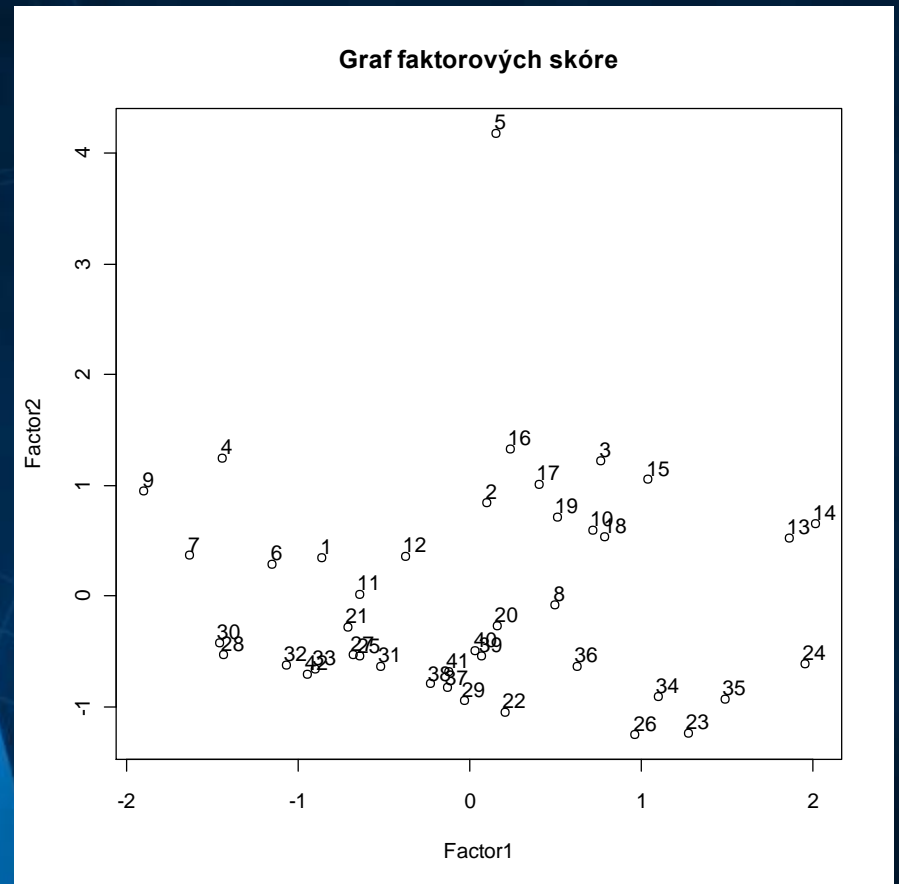
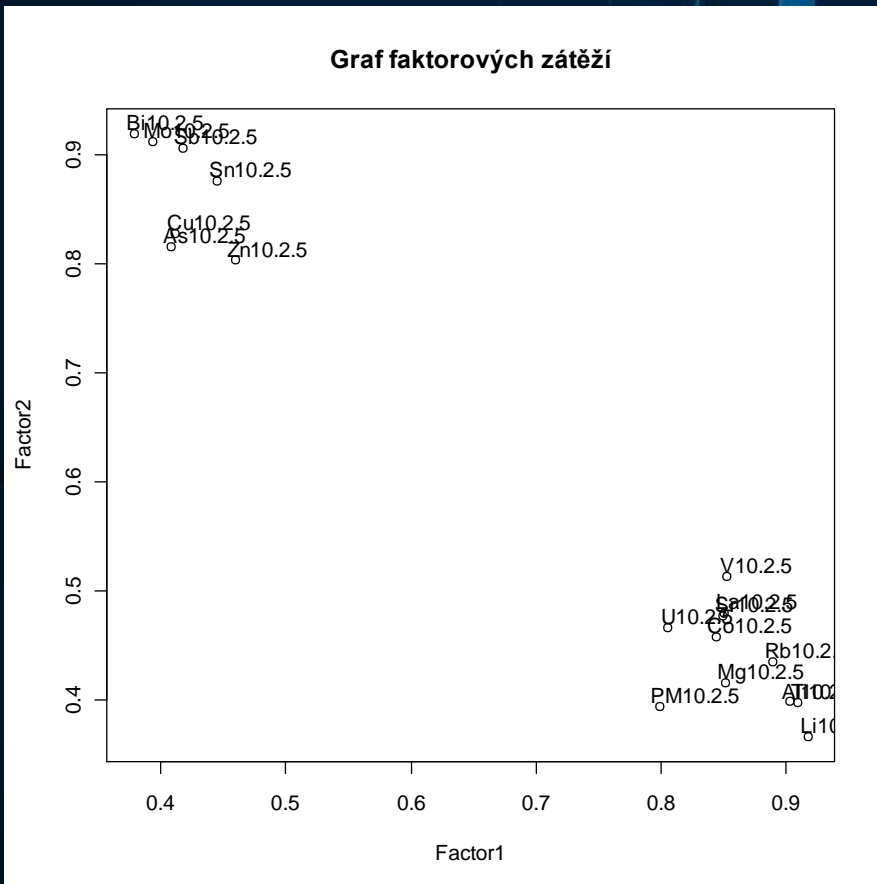
Ti Li Al Rb Mg V Sr Co La U Bi Mo Sb Sn As Cu Zn

FA - grafy

Ti Li Al Rb Mg V Sr Co La U Bi Mo Sb Sn As Cu Zn

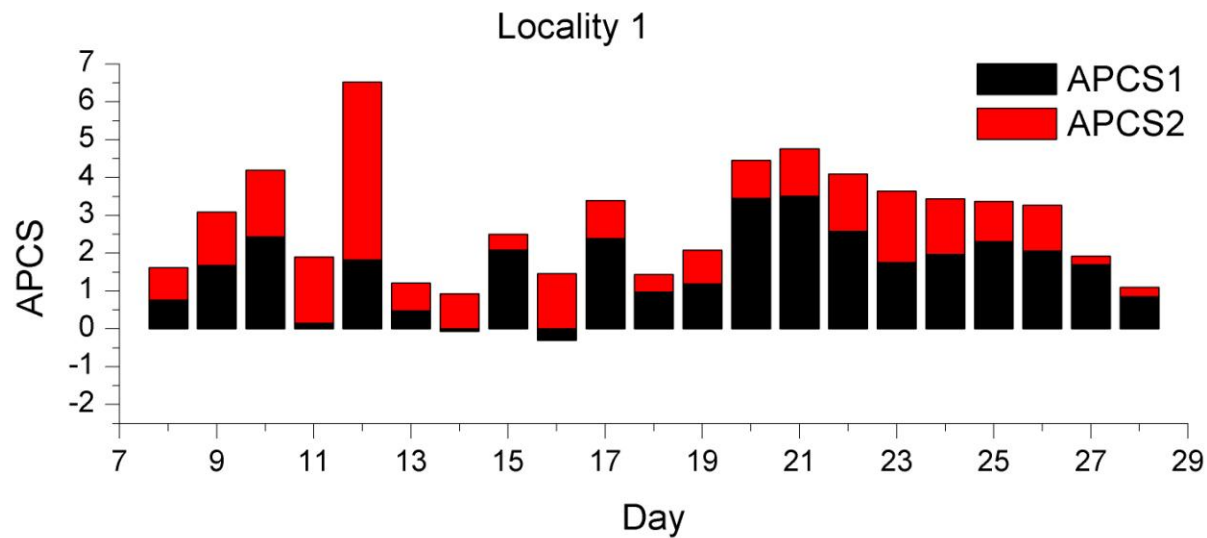
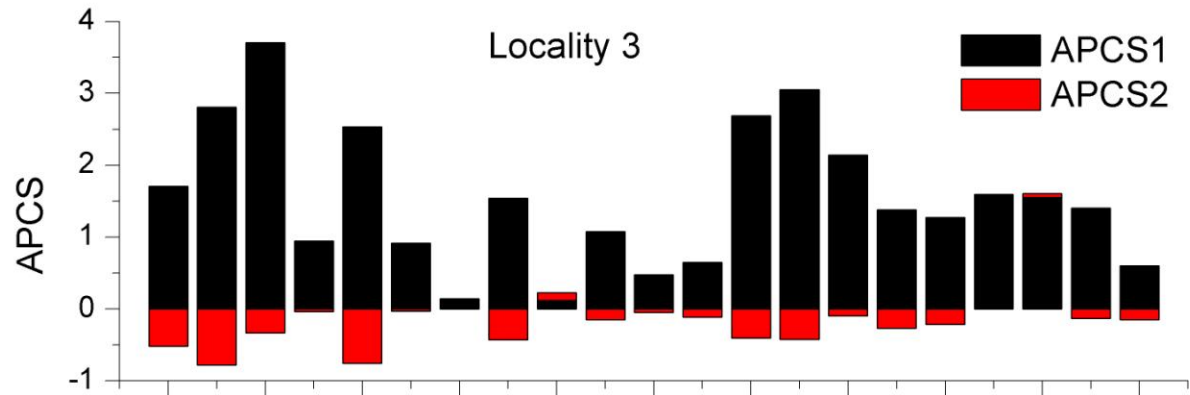
Graf faktorových zátěží pro $PM_{10-2.5}$

Graf faktorových skóre pro $PM_{10-2.5}$



APCS pro jednotlivé dny měření

PM_{10-2.5}



Faktorové zátěže pro jednotlivé proměnné

PM _{10-2.5}	Factor1	Factor2
Ti	0.918	0.38
Li	0.917	0.353
Al	0.914	0.379
Rb	0.895	0.419
Mg	0.868	0.397
V	0.863	0.498
Sr	0.861	0.46
Co	0.857	0.44
La	0.854	0.465
U	0.808	0.458
Bi	0.393	0.916
Mo	0.413	0.901
Sb	0.434	0.897
Sn	0.457	0.867
As	0.419	0.815
Cu	0.437	0.813
Zn	0.47	0.799
PM	0.803	0.381

PM _{1.0}	Factor1	Factor2	Factor3
IPy	0.914	0.25	0.175
BghiPe	0.904	0.168	0.183
BaP	0.896		0.218
BeP	0.865	0.307	0.37
BbF	0.856	0.354	0.325
BkF	0.788	0.266	0.409
Cor	0.714	0.132	0.188
Zn	0.219	0.883	0.237
Pb	0.137	0.838	0.1
K	0.255	0.722	0.293
Fla	0.298	0.271	0.885
Py	0.459	0.28	0.825
PM	0.26	0.466	0.485

PM _{1.0}	Factor1	Factor2	Factor3
K	0.904	0.208	0.155
Cd	0.899	0.195	0.306
Zn	0.876	0.185	0.251
Rb	0.842	0.409	0.102
Tl	0.842	0.262	
Ga	0.791	0.348	0.163
As	0.784		0.353
Pb	0.783		0.286
Bi	0.752	0.135	0.294
Sn	0.739	0.482	0.263
Sb	0.729	0.313	0.373
Mn	0.709	0.35	0.345
Se	0.705	0.202	0.246
Al	0.27	0.947	
Ti	0.302	0.902	
Mg	0.273	0.891	
La	0.342	0.868	
Ca	0.159	0.858	0.129
Ir		0.76	
Ni	0.29		0.943
Cr	0.174		0.924
Mo	0.413	0.113	0.8
Hg	0.408	-0.123	0.688
PM	0.842	0.345	0.114

PM _{2.5}	Factor1	Factor2	Factor3
Cd	0.914	0.23	0.254
K	0.9	0.225	0.113
Zn	0.845	0.24	0.232
Ga	0.79	0.342	0.131
Pb	0.786	0.181	0.232
Tl	0.753	0.34	0.205
Al	0.254	0.951	
Ti	0.291	0.927	
La	0.297	0.846	0.154
Ca	0.231	0.764	0.388
Sr	0.2	0.232	0.949
U	0.47		0.713
PM	0.863	0.282	0.215

Příspěvky zdrojů k produkci PM

Locality	PM _{10-2.5} Action 3				PM _{2.5} Action 3					PM _{1.0} Action 3				
	Unresolved	Factor1	Factor2	Suma	Unresolved	Factor1	Factor2	Factor3	Suma	Unresolved	Factor1	Factor2	Factor3	Suma
L1 [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]	2.13	11.88	4.30	18.31	8.50	10.45	6.68	2.66	28.28	7.65	10.70	6.75	0.45	25.54
L3 [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]	-1.53	11.35	-0.77	9.05	6.86	14.37	4.51	2.17	27.90	5.25	12.56	2.76	0.25	20.82
L1 [%]	11.6	64.9	23.5	100.00	30.1	36.9	23.6	9.4	100.00	29.9	41.9	26.4	1.8	100.00
L3 [%]	-16.9	125.5	-8.5	100.00	24.6	51.5	16.2	7.8	100.00	25.2	60.3	13.3	1.2	100.00
	Al Ti La	Zn			Zn	Al Ti La				Zn	Al Ti La			

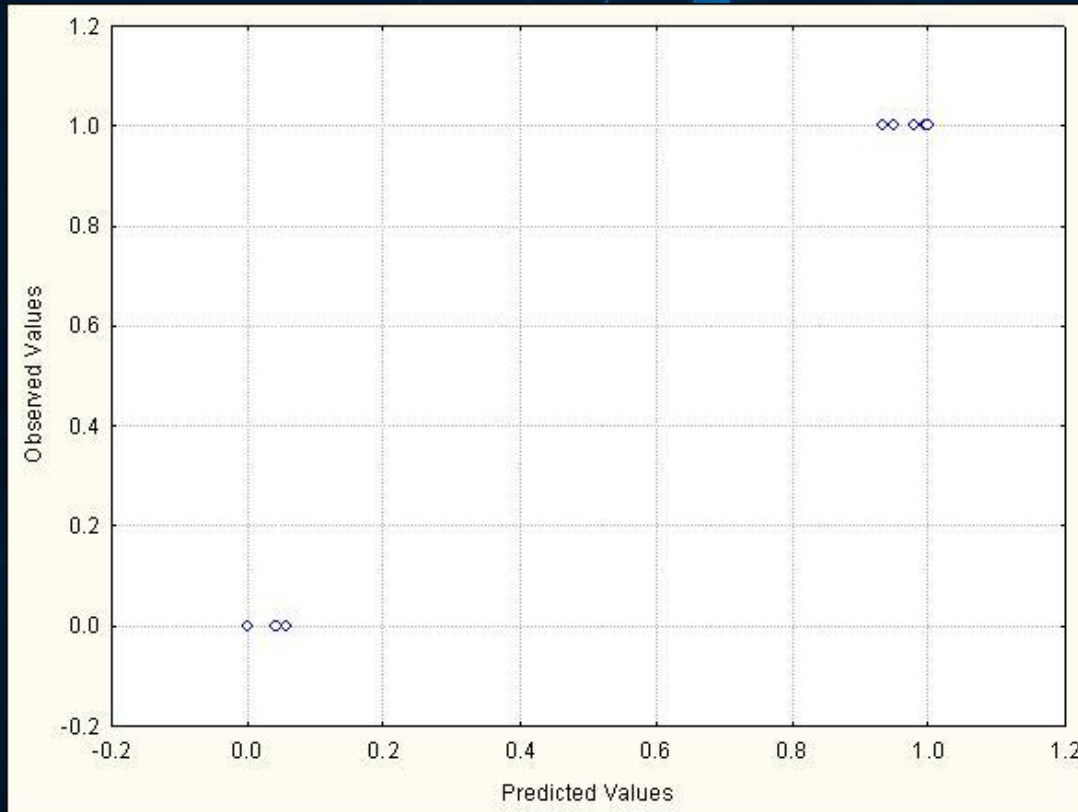
Locality	PM _{1.0} Action 2				
	Unresolved	Factor1	Factor2	Factor3	Suma
L1 [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]	11.41	0.64	6.34	4.32	22.70
L3 [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]	9.71	1.00	6.46	2.18	19.36
L1 [%]	50.2	2.8	27.9	19.0	100.00
L3 [%]	50.2	5.2	33.4	11.3	100.00
	PAH	Zn	Fla Py		

Další využití APCS

Klasifikace lokalit:

APCS nemají normální rozdělení=>nelze použít DA

Klasifikace lokalit logistickou regresí pro PM2.5 a PM10-2.5 – Akce 3



Parameter	Estimate
Const.B0	1.91
Factor1PM2.5	6.46
Factor2PM2.5	2.85
Factor3PM2.5	4.19
Factor1PM10-2.5	-8.32
Factor2PM10-2.5	-21.87

100% úspěšnost regrese

Další využití APCS

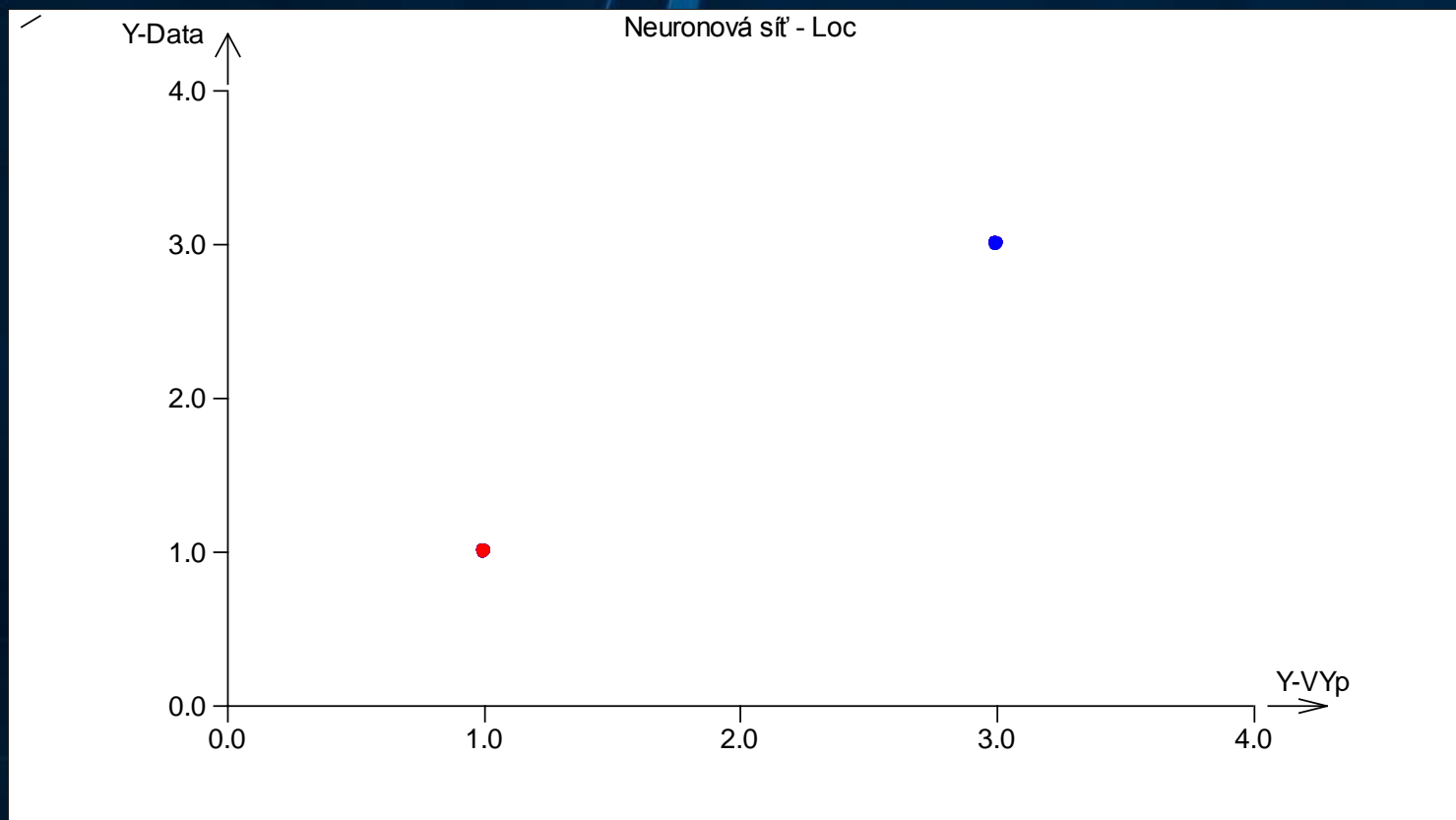
Klasifikace lokalit neuronovými sítěmi pro PM2.5 a PM10-2.5 – Akce 3

Strmost sigmoidy :	3.01
Moment :	0.9
Rychlost učení :	0.1
Ukončit při chybě < :	0.05
Procent dat pro učení (%) :	70
Podmínky ukončení optimalizace	
Počet iterací :	100000
Výpočet	
Počet iterací :	100001
Maximální chyba pro učící data :	2.139E-007
Střední chyba pro učící data :	2.717E-008
Maximální chyba pro testovací data :	7.712E-007
Střední chyba pro testovací data :	7.255E-008

Vrstva / Neuron	1. Váha	2. Váha	3. Váha	4. Váha	5. Váha	
2 / 1	-0.460	0.010	0.654	0.093	3.427	0.897
2 / 2	-2.269	-0.773	-0.940	2.008	7.922	3.164
2 / 3	-0.333	-0.021	0.205	0.062	2.604	1.459
3 / 1	0.678	2.310	0.761			-1.422
3 / 2	0.402	1.965	0.723			-1.257
3 / 3	1.134	2.756	0.916			-1.675
4 / 1	-2.039	-1.708	-2.516			3.030

Další využití APCS

Klasifikace lokalit neuronovými sítěmi pro PM2.5 a PM10-2.5 – Akce 3



100% úspěšnost klasifikace

Závěry

- Částice pocházející z minerálů a hornin zemské kůry. Podíl téměř 100 % pro hrubou frakci se středním aerodynamickým průměrem 2.5 až 10 μm ; cca 10 až 20 % pro jemnou frakci se středním aerodynamickým průměrem pod 1 μm .
- Emise z dopravy - podíl na znečištění ovzduší částicemi PM_{10} v lokalitách se silnou dopravní zátěží (36 tis. vozidel za den) kolem 20 %, na lokalitách s menší zátěží (8 tis. vozidel za den) na cca 20 %, .
- Další zdroje (charakteristické obsahem kovů - Zn, Pb) - pravděpodobně nespalovací emise.
- Pro posouzení původu PM je nutné stanovit současně organickou i anorganickou složku v dostatečném rozsahu.
- Možnost využít vypočtených absolutních komponentních skóre ke klasifikaci lokalit (logistickou regresí, využitím neuronových sítí). Obě metody dávaly shodné výsledky s úplnou separací výsledků měření získaných na sledovaných lokalitách

Poděkování

Tato práce vznikla jako součást řešení výzkumného záměru „Udržitelná doprava – šance pro budoucnost“ financovaném Ministerstvem dopravy ČR a projektu KONTAKT financovaným Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR.