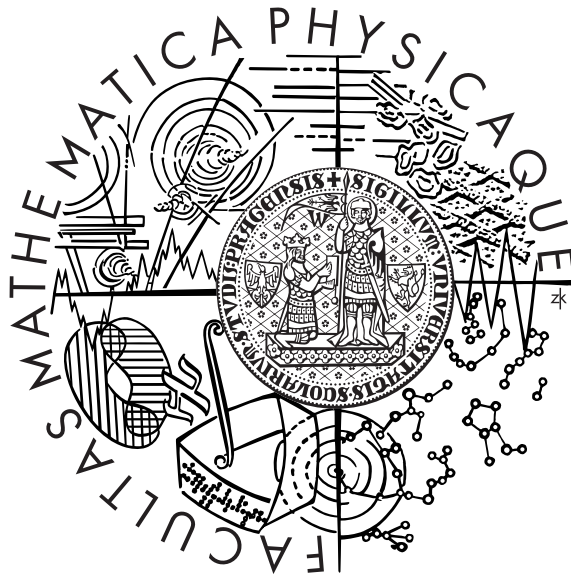


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Lukáš Lejdar

Lagrangeovský disperzní model

Katedra fyziky atmosféry

Vedoucí diplomové práce: doc. RNDr. Josef Brechler, CSc.
Studijní program: Fyzika
Studijní obor: Meteorologie a klimatologie

2015

Děkuji vedoucímu mé práce docentu Brechlerovi za veškerý čas, který mi věnoval. Děkuji také konzultantovi mé práce doktoru Fukovi za velice cenné rady při vývoji modelu.

Děkuji celé své rodině a všem přátelům za veškerou podporu, kterou mi po dobu mých studií poskytovali.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Borovnici dne 31.7.2015

Podpis

Název práce: Lagrangeovský disperzní model

Autor: Lukáš Lejdar

Katedra: Katedra fyziky atmosféry

Vedoucí diplomové práce: doc. RNDr. Josef Brechler, CSc.

Abstrakt: V otázkách ochrany životního prostředí je jedním z velmi důležitých aspektů možnost určovat dopady různých zdrojů znečištění ovzduší na kvalitu vzduchu v oblastech více či méně vzdálených od těchto zdrojů. Pro takovéto předpovědi je možné využít fyzikální či matematické modelování. V této práci je vyvinut a představen zástupce jedné z podkategorií počítačových modelů počítajících šíření znečištění v ovzduší - lagrangeovský dispersní model (LDM). Jedná se o model, který byl navržen pro práci uvnitř modelu CLMM - Charles University Large-Eddy Microscale Model, vyvinutého na Katedře fyziky atmosféry MFF UK. Práce se věnuje jak popisu teorie těchto modelů, tak konkrétním technickým řešením využitým při vývoji LDM. Model je validován a následně aplikován na několik případů s rozdílně složitou geometrií zkoumaného problému.

Klíčová slova: lagrangeovský model, znečištění, transport, rozptyl

Title: Lagrangian dispersion model

Author: Lukáš Lejdar

Department: Department of Atmospheric Physics

Supervisor: doc. RNDr. Josef Brechler, CSc.

Abstract: In a field of environmental protection there is a very important question about the options to determine impact of different pollution sources on air quality in areas more or less distant from those sources. For those predictions we can use physical or computer modelling. In this paper a computer model (Lagrangian Dispersion Model, or LDM) of air pollution propagation is developed and described. The LDM was created in order to work within the CLMM - Charles University Large-Eddy Microscale Model. In this paper we discuss theory of those models as well as technical solutions used to develop the LDM. The model is validated and subsequently applied on several cases with different degree of geometry complexity.

Keywords: lagrangian model, pollution, transport, dispersion

Obsah

Obsah

1	Úvod	1
2	Mezní vrstva atmosféry (ABL)	3
3	Numerické simulace atmosféry	5
3.1	Stručná historie numerických simulací atmosféry	5
3.2	Řídící rovnice	6
3.2.1	Rovnice kontinuity	6
3.2.2	Pohybové rovnice	6
3.2.3	Energetická rovnice	6
3.3	Nutnost modelování turbulence	7
4	Modelování turbulence, RANS a LES	8
4.1	Reynolds-Averaged Navier-Stokes	8
4.2	Large Eddy Simulation	9
5	Charles University Large-eddy Microscale Model (CLMM)	11
6	Modelování šíření znečištění ovzduší	13
6.1	Gaussovské modely	13
6.2	Eulerovské modely	14
6.3	Lagrangeovské modely	14
7	Lagrangeovský disperzní model (LDM)	15
7.1	Vlastnosti LDM	15
7.1.1	Spojový seznam	15
7.1.2	Paralelizace	16
7.1.3	Modelované zdroje znečištění	17
7.1.4	Řídící rovnice	18
7.1.5	Použitá řešení	19
7.1.5.1	Interpolační schéma	19
7.1.5.2	Subgridní model	21
7.1.5.3	Integrační schéma	23
7.1.5.4	Okrajové schéma a překážky	24
7.1.6	Možnosti datových výstupů	24
7.2	Diagram kódu	26
7.3	Testy výkonu	27
8	Validace modelu	31
8.1	Stabilita modelu	31
8.2	Well mixed podmínka	31
8.3	Porovnání s výsledky experimentu ve větrném tunelu	34

9	Výsledky z modelu LDM	41
9.1	CEDVAL A1-5	41
9.1.1	Pohyb částic v prostoru	42
9.1.2	Vývoj přízemní koncentrace	45
9.1.3	Průměrná přízemní koncentrace	48
9.1.4	Maximální dosažená přízemní koncentrace	48
9.2	Zpětný schod	49
9.2.1	Vývoj vertikálního profilu koncentrace	49
9.2.2	Průměrná koncentrace	51
9.3	Seskupení budov	51
9.3.1	Vývoj přízemní koncentrace	52
9.3.2	Maximální dosažená přízemní koncentrace	54
9.3.3	Trajektorie částic	54
10	Závěr	55
10.1	Dosažené výsledky	55
10.2	Další možný postup při vývoji	56
	Literatura	58

1. Úvod

Lagrangeovský dispersní model a znečištění ovzduší.

V této práci bude představen nově vyvinutý *Lagrangeovský dispersní model (LDM)*. Modely tohoto typu jsou velice často využívány k popisu šíření znečištění v ovzduší.

Existují dva základní přístupy k modelování proudění a šíření znečištění: *fyzikální modelování* a *matematické modelování*. V případě fyzikálního modelování měříme parametry proudění nad zmenšeným modelem terénu při zachování určitých kritérií podobnosti. Tento přístup zpravidla vyžaduje drahé experimentální vybavení. V případě matematického modelování řešíme rovnice popisující proudění numericky za pomoci počítačů. Náročnost tohoto přístupu spočívá ve složitosti příslušných parciálních diferenciálních rovnic a také ve vysoké turbulentnosti proudění poblíž zemského povrchu, což vyžaduje zavedení nejrůznějších modelů turbulence.

Nástroje umožňující popis šíření znečištění jsou však důležité z pohledu ochrany životního prostředí. Dovolují nám totiž posoudit vliv široké škály antropogenních i přírodních zdrojů znečištění na kvalitu ovzduší a potažmo i životního prostředí jako celku. Díky nim můžeme například dopředu odhadnout dopady zřízení nových zdrojů znečištění ovzduší (např. komín spalovny) na kvalitu vzduchu v bližším, či vzdálenějším okolí potenciální výstavby. Mezi dalšími oblastmi použití můžeme jmenovat například vytváření krizových scénářů pro případ havárie v chemických závodech, posouzení vlivu různých stavebních řešení v okolí silnic, či předpověď území zasaženého kouřem při lesním požáru.

Vidíme, že možnosti využití takovýchto modelů jsou opravdu široké a různorodé. Zde představený LDM byl navrhnout a vyvinut pro práci v rámci modelu *CLMM*. Charles University Large-Eddy Microscale Model (CLMM) se využívá pro výpočet pole proudění v komplexní geometrii s ohledem na atmosferické podmínky.[6] Tento model byl v minulosti použit například při studiu stabilně zvrstvené mezní vrstvy atmosféry[7]. LDM využívá pole proudění vypočtená pomocí CLMM k určení pohybu „částic“ znečištění.

Členění práce.

V této práci jsou nejprve popsány teoretické otázky modelování proudění a šíření znečištění. Následně jsou ukázána konkrétní technická řešení použitá v LDM. V závěru jsou ukázány výsledky použití modelu LDM na několika příkladech.

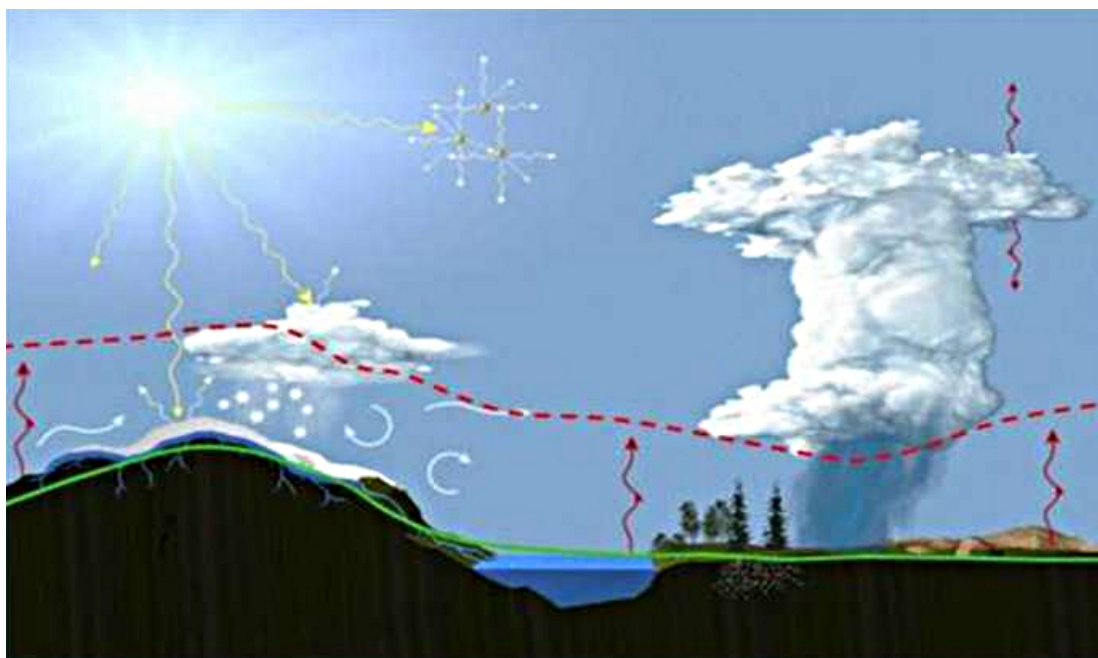
Stručný popis obsahu jednotlivých kapitol:

- Kapitola 2 se věnuje definici a popisu mezní vrstvy atmosféry.
- Kapitola 3 velmi stručně popisuje historii numerických simulací atmosféry a zavádí řídicí rovnice, které se při simulacích uplatňují.
- V kapitole 4 jsou uvedeny základy různých přístupů k modelování turbulence a klíčové principy simulace velkých vírů (LES), která je použita v modelu CLMM.
- Kapitola 5 popisuje základní vlastnosti modelu CLMM.
- Kapitola 6 diskutuje různé přístupy k modelování šíření znečištění - obzvláště rozdíly mezi Eulerovským a Lagrangeovským přístupem. Jsou zde také definované různé typy zdrojů znečištění, které se v modelování využívají.
- V kapitole 7 je popsán vývoj Lagrangeovského dispersního modelu (LDM), jeho vlastnosti a schopnosti. LDM je zde popsán z teoretického hlediska i z hlediska praktických řešení jednotlivých problémů.
- V kapitole 8 je zkoumána validita modelu pomocí splnění „well mixed“ podmínky a pomocí srovnání s výsledky experimentu ve větrném tunelu.
- Kapitola 9 se věnuje prezentaci výsledků simulací modelu LDM při různém geometrickém uspořádání překážek.
- V závěrečné kapitole 10 jsou hodnoceny dosažené výsledky a diskutován případný další postup při vývoji modelu.

2. Mezní vrstva atmosféry (ABL)

Zemskou atmosféru můžeme rozdělit do mnoha vertikálních vrstev. Nejnižší vrstva atmosféry, ve které se rodí většina projevů počasí, se nazývá *troposféra*. Její vertikální mohutnost se pohybuje zhruba mezi 8 km (na pólech) a 18 km (na rovníku).

Vrstva troposféry, jejíž vlastnosti jsou přímo ovlivněny kontaktem se zemským povrchem, se nazývá *mezní vrstva atmosféry* - v anglické literatuře označována jako *atmospheric boundary layer (ABL)*, nebo též *planetary boundary layer (PBL)*. Vertikální mohutnost ABL se pohybuje v rozmezí od několika stovek metrů až po zhruba 2 km v závislosti na místních podmínkách.



Obrázek 2.1: Hranice mezní vrstvy atmosféry, zdroj: esrl.noaa.gov

Mezi vlastnosti povrchu, které ovlivňují mezní vrstvu, patří především jeho drsnost a teplota. Drsnost povrchu určuje tření proudícího vzduchu o zemský povrch a tím i vznik tzv. *mechanické turbulence*. Ohřátím vzduchu od zemského povrchu vzniká instabilní teplotní zvrstvení, které je příčinou tzv. *termické turbulence*.

Mezní vrstva se obvykle dále dělí na *přízemní podvrstvu* (nebo též vrstvu konstantního toku) a na *spirální* (též Ekmanovu) *vrstvu*. Přízemní podvrstva zaujímá přibližně spodních 10 % z mezní vrstvy. Obvykle se uvádí typická vertikální mohutnost přízemní podvrstvy 50 m. V přízemní podvrstvě se směr proudění, ani vertikální toky

(např. hybnosti a tepla) příliš nemění. Ve spirální vrstvě pak dochází s výškou k postupné disipaci turbulence. Tato vrstva tedy funguje jako přechod mezi přízemní podvrstvou s dominantní turbulencí a volnou troposférou, kde se směr větru blíží geostrofickému.

Jak vidíme, je pochopení procesů probíhajících v mezní vrstvě velmi důležité pro předpověď počasí i pro zkoumání šíření znečištění. Detailní pojednání o mezní vrstvě můžeme najít například zde [3].

3. Numerické simulace atmosféry

3.1 Stručná historie numerických simulací atmosféry

Lidstvo se v průběhu celé své historie snažilo různými způsoby předpovídat počasí. Až do konce 19. století byly předpovědní metody založeny výhradně na empirických znalostech, a byly tedy značně subjektivní.

Ve své práci[1] z roku 1901 Clevelend Abbe navrhuje použít principy hydrodynamiky a termodynamiky, které byly zkoumány již v minulém století, také na atmosféru. Vždyť první rovnice pohybu ideální tekutiny pocházejí již od Eulera z roku 1757. Claude Navier v roce 1822 odvodil rovnice pro viskózní tekutiny a jeho práci dále vylepšoval George Stokes v 50. letech 19. století. První termodynamický zákon v celém znění pak publikoval v roce 1850 Rudolf Clausius.

Základní dvoukrokou proceduru předpovědi počasí odvodil v roce 1904 Vilhelm Bjerkens. První, diagnostický krok, vede k určení počátečních podmínek - počátečního stavu atmosféry. Ve druhém, prognostickém kroku, se řeší Cauchyho úloha - příslušné diferenciální rovnice s počáteční podmínkou. Bjerkens také určil, jaké parametry popisují počáteční stav atmosféry a jaké rovnice je možné použít k určení budoucího stavu atmosféry pomocí numerických metod[14].

První pokus o numerickou předpověď počasí uskutečnil v roce 1922 Lewis Fry Richardson. Šestihodinovou předpověď počítal ručně a zabralo mu to nejméně šest týdnů. Předpověď ovšem nebyla úspěšná. Důvodem byla nerovnováha mezi poli proudění a tlaku v počátečních podmínkách[12].

První úspěšný pokus proběhl za použití počítače ENIAC v roce 1950. Podepsáni pod tímto úspěchem jsou meteorologové Jule Charney, Philip Thompson, Ragnar Fjørtoft, Larry Gates a matematik John von Neumann. Vytvořit dvacetičtyřhodinovou předpověď jim trvala skoro oněch celých 24 hodin. Takovéto předpovědi jsou pochopitelně v praxi nepoužitelné.

Rychlý vývoj v oblasti počítačů však umožnil zavedení prvních operativních předpovědí již v roce 1966 a to ve Spojených státech a také v tehdejší Západní Německu.

3.2 Řídící rovnice

Pro odvození rovnic popisujících proudění tekutin můžeme využít jednotlivých zákonů zachování. Detaily odvození je možné najít v literatuře (detailně např. zde [3], nebo zde [6]), zde se omezíme pouze na krátký popis těchto rovnic.

3.2.1 Rovnice kontinuity

Ze zákona zachování hmoty můžeme odvodit rovnici kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

kde ρ je hustota tekutiny a \mathbf{u} vektor rychlosti proudění tekutiny. V případech, kdy můžeme hustotu považovat za konstantí ($\rho = \textit{konst.}$), se rovnice (3.1) zjednoduší na tvar

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0. \quad (3.2)$$

3.2.2 Pohybové rovnice

Ze zákona zachování hybnosti můžeme odvodit pohybové rovnice

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \cdot \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad (3.3)$$

kde p je tlak, ν je kinematická viskozita, \mathbf{f} je součet objemových sil a ∇ operátor nabla.

3.2.3 Energetická rovnice

Z prvního termodynamického zákona můžeme odvodit rovnici vyjadřující zachování energie. Tuto rovnici je možné zapsat v různých tvarech. Za určitých zjednodušujících předpokladů (viz např. [6]) například ve tvaru

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = \kappa \nabla^2 T, \quad (3.4)$$

kde T je teplota a κ molekulární difuzivita. Pro podmínky panující v reálné atmosféře je vhodnější přepsat rovnici 3.4 do tvaru pro potenciální teplotu θ

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\theta) = \kappa \nabla^2 \theta, \quad (3.5)$$

kde potenciální teplota je definována vztahem

$$\theta = T \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\frac{R}{c_p}}, \quad (3.6)$$

kde p_0 je referenční tlaková hladina, obvykle 1000 hPa, R univerzální plynová konstanta a c_p měrná tepelná kapacita za konstantního tlaku.

Rovnici kontinuity (3.1) společně s pohybovými rovnicemi (3.3) a s energetickou rovnicí 3.5 nazýváme souhrným názvem *Navierovy-Stokesovy rovnice*.

3.3 Nutnost modelování turbulence

Při pokusu řešit Navierovy-Stokesovy rovnice přímou numerickou simulací (DNS) naráží modely na nutnost vypočítávat turbulenci všech časových i prostorových měřítek. Náročnost takovýchto výpočtů však pro většinu praktických aplikací překračuje možnosti současných nejvýkonnějších počítačů.

Tento problém je možné řešit například přístupem nazývaným *RANS* (Reynolds-averaged Navier–Stokes Equations), nebo metodou *LES* (Large Eddy Simulation), kdy víry větších měřítek jsou počítány přímo a víry menších měřítek jsou modelovány. Modelováním nazýváme postup, kdy procesy určitých (menších) měřítek popisujeme pomocí parametrů přímo vypočítaných modelem pro jiná (větší) měřítko. Blíže se tomuto tématu a především pak metodě LES věnuje následující kapitola 4.

4. Modelování turbulence, RANS a LES

Jak bylo ukázáno v předchozí kapitole (2), je proudění v mezní vrstvě atmosféry turbulentní. Vyskytují se zde víry z širokého spektra prostorových i časových měřítek. Velké víry se postupně rozpadají na menší a menší. Dochází tak k velice složitému procesu, při kterém se energie přesouvá z oblasti velkých měřítek do oblasti malých měřítek, ve kterých dochází k disipaci energie na teplo.

Nejmenší víry, které můžeme v proudění očekávat před tím, než se úplně rozpadnou, určuje takzvané *Kolmogorovo mikroměřítka*, které je definováno vztahem[9]

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad (4.1)$$

kde ν je kinematická viskozita a ε je rychlost disipace turbulentní kinetické energie.

Při proudění v mezní vrstvě dosahuje η řádu typicky 1 mm. Navierovy-Stokesovy rovnice uvedené v kapitole (3.2) můžeme zkusit řešit přímo. Takový postup se nazývá *Direct Numerical Simulation* (DNS). Řešení zpravidla hledáme na mřížce tzv. uzlových bodů. Metoda DNS musí přímo popsat víry všech měřítek a tudíž vyžaduje mřížku s velice vysokým rozlišením. Ukazuje se, že pro většinu úloh z praxe je objem potřebných výpočtů nad možností dnešních počítačů.

4.1 Reynolds-Averaged Navier-Stokes

Jednou z možností, jak se s tímto problémem vypořádat, je přístup nazývaný *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS). Hlavní myšlenkou metody RANS je rozložení všech veličin (zde např. $\mathbf{u}(t)$) na jejich časový průměr ($\overline{\mathbf{u}}$) a odchylku od tohoto průměru ($\mathbf{u}'(t)$), takže platí

$$\mathbf{u}(t) = \overline{\mathbf{u}} + \mathbf{u}'(t). \quad (4.2)$$

Přičemž

$$\overline{\mathbf{u}} = \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{u}(t) dt \quad \text{a} \quad \overline{\mathbf{u}'} = 0. \quad (4.3)$$

Toto takzvané *Raynoldsovo průměrování* je následně aplikováno na Naviérov-Stokesovy rovnice. Výsledkem jsou *Reynoldsovy rovnice*, jejichž tvar a odvození je uvedeno např. zde [19]. Dostáváme zde tedy rovnice pro časové průměry jednotlivých veličin. Nevýhodou tohoto přístupu je, že se v Reynoldsových rovnicích objevuje nový člen - *tenzor Reynoldsových napětí*

$$\tau_{ij} = \rho \overline{u'_i u'_j}, \quad (4.4)$$

jehož složky nelze vyjádřit pomocí počítaných veličin. Aby byl celý problém řešitelný, musí se takzvaně uzavřít, neboli je potřeba vyjádřit složky tenzoru Reynoldsova napětí pomocí počítaných proměnných. Právě způsob, kterým se uzavření problému provede, je základem rozdílů mezi jednotlivými modely třídy RANS.

4.2 Large Eddy Simulation

Další z možností, jak se vypořádat s přílišnou výpočetní náročností DNS, je přístup s názvem *Large eddy simulation* (LES). Výpočetní náročností leží LES mezi DNS a RANS.

Princip LES navrhl Joseph Smagorinsky ve své práci [16] z roku 1963. Hlavní myšlenka tohoto přístupu spočívá v rozdělení vírů podle velikosti. Velké víry jsou simulovány přímo, stejně jako v metodě DNS, ale malé víry jsou modelovány. Rozdělení vírů probíhá filtrací příslušných proměnných popisujících proudění (\mathbf{u} , p , ...). Používá se zde filtr typu dolní propust. Aplikací filtru na pole rychlosti proudění (\mathbf{u}) dojde k rozdělení na filtrovanou část ($\tilde{\mathbf{u}}$) a reziduální část (\mathbf{u}''). Můžeme psát

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}''(\mathbf{x}, t), \quad (4.5)$$

kde operaci filtrování definujeme jako konvoluci s *jádrem filtru* \mathbf{G} vztahem

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \Delta) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{r}, t) d\mathbf{r}, \quad (4.6)$$

píšeme

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \Delta) \star \mathbf{u}(\mathbf{x}, t). \quad (4.7)$$

Pro jádro filtru platí normovací podmínka

$$\int \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{x}, \Delta) d\mathbf{r} = 1. \quad (4.8)$$

Rovnice 4.5 má stejný tvar, jako rovnice 4.2. Je však potřeba podotknout, že v metodě RANS probíhá filtrace pro časová měřítka, ale v metodě LES pro prostorová měřítka. V LES pak neplatí vztahy analogické ke vztahům 4.3, které platí v metodě RANS. Neplatnost takovýchto vztahů je vidět už z definice 4.6.

Důležitou vlastností funkce \mathbf{G} je *šířka filtru* Δ . Šířka filtru určuje velikost vírů, které je potřeba modelovat. Čím je větší šířka filtru, tím je větší oblast vírů, které jsou modelovány. Při snižování velikosti šířky filtru až na hodnotu Kolmogorova mikroměřítka přechází LES prakticky v DNS.

Aplikací filtru na Navierovy-Stokesovy rovnice dostaneme rovnice pro filtrovanou část pole rychlosti proudění ve tvaru (detailně např. zde [15])

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}) = -\frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p} + \nu \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}} \quad (4.9)$$

$$\nabla \tilde{\mathbf{u}} = 0. \quad (4.10)$$

Na levé straně rovnice 4.9 dostáváme člen obsahující $\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}$, který nelze vyjádřit pomocí počítaných proměnných. Pokud definujeme *tenzor reziduálních* (též *subgridních*) *napětí* výrazem

$$\boldsymbol{\tau}^r = \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}} - \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}, \quad (4.11)$$

můžeme přepsat rovnici 4.9 do tvaru

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}) = -\frac{1}{\rho} \nabla \tilde{p} + \nu \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \boldsymbol{\tau}^r. \quad (4.12)$$

Tenzor $\boldsymbol{\tau}^r$ popisuje vliv vírů malých měřítek. Jelikož jeho hodnotu nejsme schopni vyjádřit pomocí počítaných proměnných (problém tedy nelze uzavřít), musíme použít k výpočtu jeho složek subgridní model.

Subgridních modelů vznikla v minulosti celá řada. První se objevil v již zmiňované Smagorinského práci [16] a nese jeho jméno - *Smagorinského model*. Tento a další různé subgridní modely jsou detailně popsány například zde [6].

5. Charles University Large-eddy Microscale Model (CLMM)

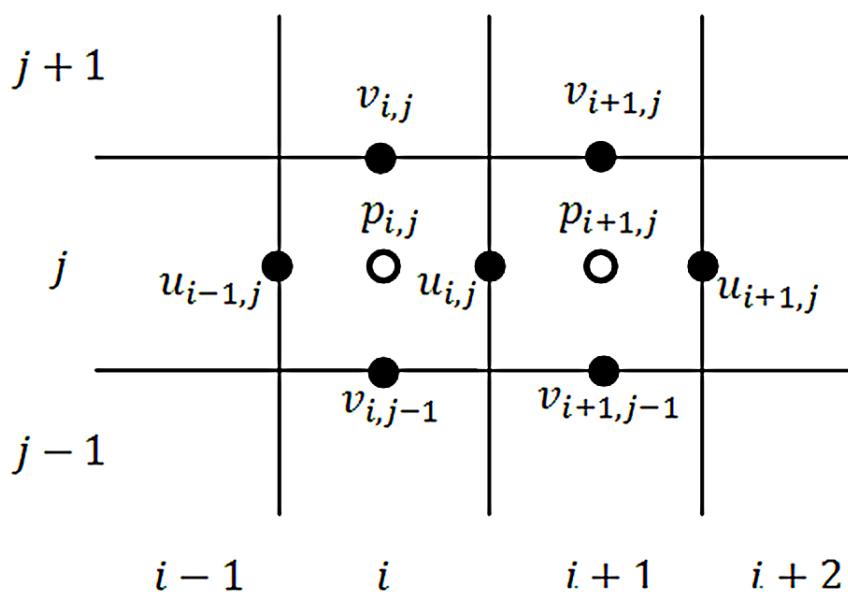
Charles University Large-eddy Microscale Model (CLMM) je vyvíjen na Katedře fyziky atmosféry Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy v Praze. V této kapitole budou shrnuty nejzákladnější vlastnosti tohoto modelu. Model CLMM je ve všech svých detailech popsán zde [6].

CLMM je 3D LES model nestlačitelného turbulentního atmosférického proudění v mikroměřítku. Komplexní geometrie je popsána metodou vnořené hranice.

Výraznou vlastností modelu CLMM je jeho konfigurovatelnost. Pro konkrétní úlohy je možné nastavit např. typ LES filtru, nebo typ subgridního modelu (viz kapitola 4.2), případně parametry použitých numerických metod, stejně jako nejrůznější možnosti výstupních dat.

LES filtr je možné nastavit implicitní i explicitní. Jako subgridní model je možné vybrat Smagorinského model, Vremanův model, nebo σ -model.

Model CLMM je napsán v jazyce Fortran 2008. Pro zvýšení výkonu byla implementována paralelizace. Pro výpočty na počítačích se sdílenou pamětí je k paralelizaci použito OpenMP. Pro výpočty na počítačích s distribuovanou pamětí (clustery) pak MPI.



Obrázek 5.1: Posunutá síť

Z numerického hlediska je model vytvořen kombinací metody konečných diferencí a metody konečných objemů na rovnoměrné posunuté kartézské síti. Posunutá síť znamená, že různé proměnné (\mathbf{u} , p , ...) pro jednotlivé kontrolní objemy nejsou definovány ve stejném bodě. Princip posunuté sítě je znázorněn na obrázku 5.1. Důvodem k zavedení posunuté sítě je numerická stabilita. Na mřížce, kde jsou všechny veličiny definovány v jednom bodě, dochází k diskretizačním chybám při výpočtu gradientu a v jejich důsledku k nefyzikálním oscilacím.

Časová diskretizace je realizována s využitím metody Runge-Kutta třetího stupně. Prostorová diskretizace používá druhou centrální diferencí.

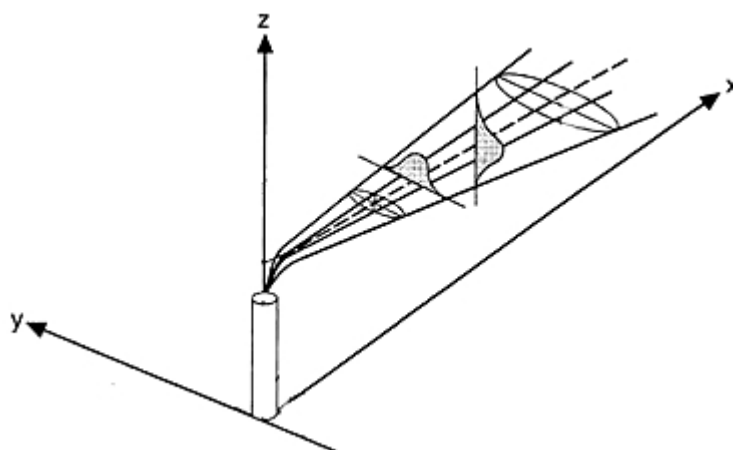
Detailní popis zde zmíněných numerických metod je možné najít např. zde [11].

6. Modelování šíření znečištění ovzduší

Téma modelování šíření znečištění ovzduší se v literatuře objevuje od 30. let 20. století. Jednu z prvních rovnic popisující rozptyl kouřové vlečky odvodili Bosanquet a Pearson ve své práci[4] z roku 1936. Na ně navázal Grahamm Sutton v roce 1947[18].

6.1 Gaussovské modely

Gaussovské modely vycházejí ze stacionárního řešení rovnice turbulentní difúze. Předpokládají tedy konstantnost porudění a intenzity zdroje znečištění v čase. Sutton ve své práci zavedl předpoklad, že koncentrace klesá se vzdáleností od osy vlečky jako Gaussova funkce, a také započítal efekt odrazu vlečky od zemského povrchu.



Obrázek 6.1: Gaussovský model rozptylu znečištění

Pokud pro jednoduchost nyní nebudeme uvažovat odraz od Země, dostaneme pro rovnovážnou hodnotu koncentrace C vztah

$$C(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\sigma_y\sigma_z} \frac{Q}{\bar{v}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z-h)^2}{\sigma_z^2} \right] \right\}, \quad (6.1)$$

kde Q je intenzita zdroje, \bar{v} velikost průměrné rychlosti proudění, h výška zdroje nad zemským povrchem a σ_y a σ_z mají význam směrodatných odchylek normálního rozložení. Odvození této rovnice je popsáno zde [3]. Grafické znázornění Gaussovského modelu vidíme na obrázku 6.1.

Výhodou Gaussovských modelů je jejich jednoduchost. Nevýhodou je pak obtížná adaptace na složitý terén a na časově proměnné podmínky proudění a emisí. Tyto modely se používají např. pro posouzení dlouhodobého vlivu nového zdroje znečištění na své okolí.

6.2 Eulerovské modely

Eulerovské modely jsou založené na numerickém řešení advektivně-difuzní rovnice na síti uzlových bodů. Tuto rovnici pro koncentraci c můžeme při zanedbání zdrojových členů zapsat ve tvaru[23]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}c) = \kappa \nabla^2 c, \quad (6.2)$$

kde κ je molekulární difuzivita. Nevýhoda Eulerovského přístupu spočívá v přítomnosti nefyzikální numerické difuze.[17][13]

6.3 Lagrangeovské modely

Detailně se Lagrangeovským modelům věnuje následující kapitola 7, zde bude pouze nastíněn jejich základní princip.

Hlavní myšlenkou Lagrangeovského přístupu je sledování trajektorií velkého počtu „částic“ znečištění v poli proudění. Slovo částice je zde v uvozovkách, protože se nemusí jednat o skutečnou částici znečištění, ale může jít o „označenou“ vzduchovou částici - objem vzduchu dostatečně velký na to, aby jeho stav mohl být popsán makroskopickými veličinami, ale dostatečně malý na to, aby nevyvolával kompenzační pohyby okolního vzduchu. Rovnice popisující trajektorii takovéto částice nabývá tvaru

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}_L(\mathbf{x}, t), \quad (6.3)$$

kde \mathbf{x} je pozice částice a \mathbf{v}_L rychlost proudění v místě částice - takzvaná *Lagrangeovská rychlost*.

Výsledné koncentrace pak jsou vypočítány z prostorového rozložení částic.

Velkou výhodou Lagrangeovských modelů oproti Eulerovským je nepřítomnost numerické difuze. Prostorové rozlišení Eulerovských modelů je dáno rozlišením výpočetní sítě, kdežto prostorové rozlišení Lagrangeovských modelů je v principu nekonečně velké.[17]

7. Lagrangeovský disperzní model (LDM)

V této kapitole bude detailně popsán Lagrangeovský disperzní model (LDM) jak z teoretického hlediska, tak z hlediska prakticky využitých technik. Všechny důležité vlastnosti modelu jsou popsány v podkapitole 7.1. V podkapitole 7.2 je schematicky znázorněna struktura výsledného programu. Výkon programu byl otestován v závislosti na jeho nastavení. V podkapitole 7.3 jsou uvedeny výsledky těchto testů.

7.1 Vlastnosti LDM

Jak již bylo uvedeno v kapitole 6.3, základní myšlenkou Lagrangeovských disperzních modelů je sledování trajektorií velkého počtu částic. Velkou výhodou tohoto přístupu je jeho názornost. Na druhou stranu však vyžaduje některá specifická řešení, která budou popsána v následujících podkapitolách.

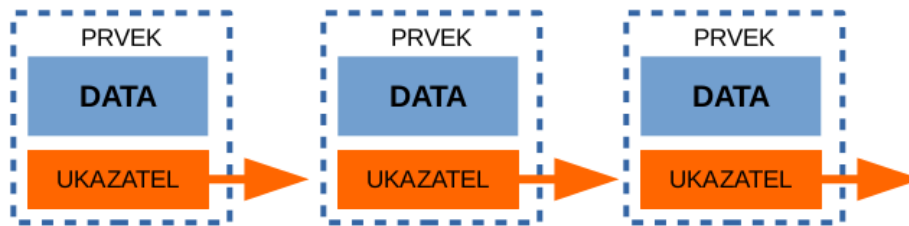
7.1.1 Spojový seznam

Jedním z problémů Lagrangeovského přístupu je, že na začátku výpočtu není jisté, s jakým počtem částic se bude pracovat. Vše záleží jak na intenzitě zdrojů znečištění, tak na charakteru proudění, nebo například na interakci částic s překážkami. Částice se během běhu programu do výpočetní domény jak přidávají, tak ji také mohou opouštět. Ve výsledku je tedy nutné využít k reprezentaci částic v programu některou z dynamických datových struktur. Jako vhodný kandidát se jeví *spojový seznam*, v anglické literatuře označovaný jako *linked list*.

Spojový seznam je dynamická datová struktura, jejíž každý jednotlivý prvek obsahuje uložená data a ukazatel na další prvek seznamu. Princip fungování spojového seznamu je znázorněn na obrázku 7.1.

V LDM každé částici odpovídá jeden prvek spojového seznamu. V datové části každého prvku je pak uložena především pozice dané částice, ale také některé další informace.

Výhodou spojového seznamu je snadné přidávání a odebírání



Obrázek 7.1: Spojový seznam.

prvků z libovolného místa seznamu, tedy přesně ty vlastnosti, které Lagrangeovský přístup vyžaduje. Nevýhodou pak je nemožnost přímého přístupu k jednotlivým prvkům. Spojový seznam umožňuje pouze sekvenční přístup - pokud chceme číst nebo zapisovat data nějakého konkrétního prvku, musíme vždy procházet seznam od prvního členu a pomocí ukazatelů projít seznam až k tomuto konkrétnímu prvku. Z tohoto důvodu se spojový seznam označuje také jako *lineární seznam*.

Tato vlastnost spojového seznamu je velice nepříjemná z hlediska paralelizace celého kódu.

7.1.2 Paralelizace

Důležitou vlastností každého programu je jeho časová náročnost. Celkový čas běhu programu může být nižší, pokud některé výpočty mohou probíhat současně - paralelně. Pokud je celkový čas běhu bez paralelizace T , tak teoreticky, pokud paralelně probíhá n výpočtů, může být nejkratší výsledný čas maximálně T/n , neboli zrychlení programu může být maximálně n . V praxi bude zrychlení vždy nižší, protože například nemusí být paralelizovaný celý kód programu, určitý výpočetní výkon se vždy využije na řízení paralelizace a paralelizovaný algoritmus může být složitější než neparalelizovaný.

Jelikož výpočty pro jednotlivé částice v LDM nejsou ovlivněny výsledky výpočtů pro jiné částice, tak tyto výpočty současně probíhat mohou. Jelikož v LDM může být až několik milionů částic, je paralelizace výpočtů na nich velice důležitá. Problémem však je použití spojového seznamu.

Algoritmus paralelizace výpočtů nad spojovým seznamem, který byl vyvinutý pro LDM, je relativně složitý. Celý seznam se místo jednou musí projít třikrát. Při prvním průchodu se určí počet prvků seznamu, při druhém se seznam rozdělí na části a při třetím průchodu

se paralelně zpracovávají jednotlivé části. Celkové zrychlení bude v tomto případě dáno poměrem náročnosti zpracování jednotlivých částí oproti náročnosti zbytku kódu. Efektivita tohoto přístupu bude zkoumána v kapitole 7.3.

Přístupy k paralelizaci se mohou lišit také podle použitého paralelního počítače. Paralelní počítače můžeme rozdělit z hlediska stavby na *multipočítače* (s distribuovanou pamětí) a *multiprocessory* (se sdílenou pamětí). LDM byl paralelizovaný a otestovaný pro použití na počítačích se sdílenou pamětí. Příkladem takovýchto počítačů je každý PC s vícejádrovým procesorem.

7.1.3 Modelované zdroje znečištění

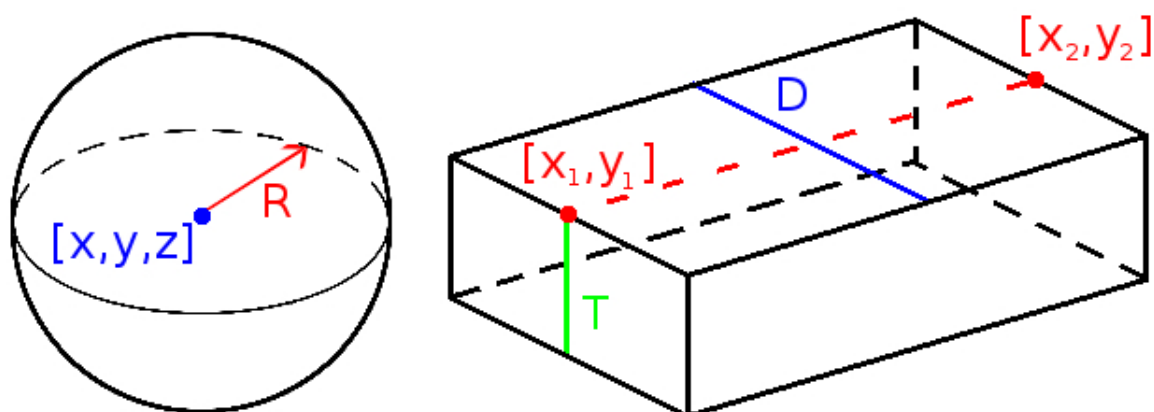
Zdroje znečištění můžeme rozdělit podle několika kritérií.[3]

Podle jejich geometrického uspořádání se zdroje dělí na *bodové*, *liniové*, *plošné* a *objemové*.

Dále můžeme zdroje dělit na *stacionární* a *mobilitní* podle toho, jestli mění svou polohu v prostoru, případně na *stacionární* a *nestacionární* z hlediska časové závislosti jejich intenzity.

V LDM jsou zavedeny dva typy základních druhů zdrojů. Dále v této práci se budou nazývat *bodové* a *liniové* podle toho, z jakých teoretických tvarů vycházejí, přestože jejich geometrie může být složitější.

Oba typy zdrojů ve výpočetní doméně vymezují oblast, do které se na náhodné místo přidávají částice. Geometrie zdrojů je znázorněna na obrázku 7.2. Vlevo je zástupce bodových zdrojů, vpravo pak zástupce liniových zdrojů.



Obrázek 7.2: Geometrie zdrojů.

Bodové zdroje jsou charakterizovány jedním bodem $[x, y, z]$ a poloměrem R . Při volbě parametru $R = 0$ dostáváme bodový zdroj, pro $R > 0$ pak kulový objemový zdroj.

Liniové zdroje jsou určeny dvěma body $[x_1, y_1]$, $[x_2, y_2]$, jejich společnou souřadnicí z a parametry tloušťky D a výšky T . Při volbě $D = 0$ a $T = 0$ dostáváme liniový zdroj, pokud je právě jeden z těchto parametrů nenulový, dostáváme plošný zdroj, a pokud jsou nenulové oba, dostáváme objemový zdroj ve tvaru kvádrů.

U všech zdrojů je možné nastavit počáteční a konečný čas jejich aktivity a jejich intenzitu. Počet zdrojů v LDM není omezen¹. Kombinací zdrojů s různým nastavením je možné modelovat mobilní i časově nestacionární zdroje.

7.1.4 Řídící rovnice

Jak již bylo několikrát zmíněno, Lagrangeovské modely počítají trajektorie velkého počtu částic. Model LDM je takzvaný *online* model, pracuje tedy souběžně s během modelu CLMM, v kontrastu k *offline* modelům, které využívají předpočítaná pole proudění. Tento přístup byl již využit například v pracích Weil et al. [22], nebo Kim et al. [8].

Rovnice popisující trajektorie částic v LDM má tvar rovnice 6.3 uvedené v kapitole 6.3, tedy

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}_L(\mathbf{x}, t). \quad (7.1)$$

Jak ukázal Thomson[20], jehož práci upravil pro požití s LES Weil et al. [22], není rychlost vypočítaná LES modelem schopna plně popsat pohyb částic. Důvodem je část turbulence nerozřešená v LES. Z tohoto důvodu musíme v LDM zavést subgridní model. Rychlost \mathbf{v}_L v rovnici 7.1 můžeme rozdělit na část vypočtenou LES modelem CLMM \mathbf{v}_{LES} a na část danou subgridním modelem \mathbf{v}_{SGS} vztahem

$$\mathbf{v}_L(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}_{LES}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v}_{SGS}(\mathbf{x}, t). \quad (7.2)$$

Pomocí tohoto vztahu můžeme přepsat rovnici 7.1 jako

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}_{LES}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v}_{SGS}(\mathbf{x}, t). \quad (7.3)$$

¹Respektive je omezen maximální hodnotou uložitelnou v jazyce Fortran do datového typu integer. Pro 32 bitový integer je to číslo 2 147 483 647.

Rovnice 7.3 je základní rovnicí LDM, která se musí v každém časovém kroku řešit pro každou jednotlivou částici.

7.1.5 Použitá řešení

Při numerickém řešení rovnice 7.3 vyvstávají některé důležité problémy, jejichž řešení určuje vlastnosti výsledného modelu.

Nejprve je potřeba určit hodnoty \mathbf{v}_{LES} a \mathbf{v}_{SGS} . Tomuto tématu se věnují oddíly 7.1.5.1 a 7.1.5.2.

Následně je třeba vybrat některé z numerických schémat řešení diferenciální rovnice 7.3. Toto téma se řeší v oddílu 7.1.5.3.

Jak naložit s částicí, která opustí výpočetní doménu, nebo narazí do pevné překážky je popsáno v oddílu 7.1.5.4.

Celý model LDM byl vyvinut tak, aby byl co nejvíce modulární. Toto řešení, přestože je programátorsky náročnější, umožňuje do budoucna jednoduché doplnění různých funkcí, případně změny v současně použitých metodách.

Výhodou modelu LDM je také jeho konfigurovatelnost. Uživatel si může zvolit z různých přístupů k řešení jednotlivých problémů a tím ovlivnit rychlost a přesnost modelu.

7.1.5.1 Interpolační schéma

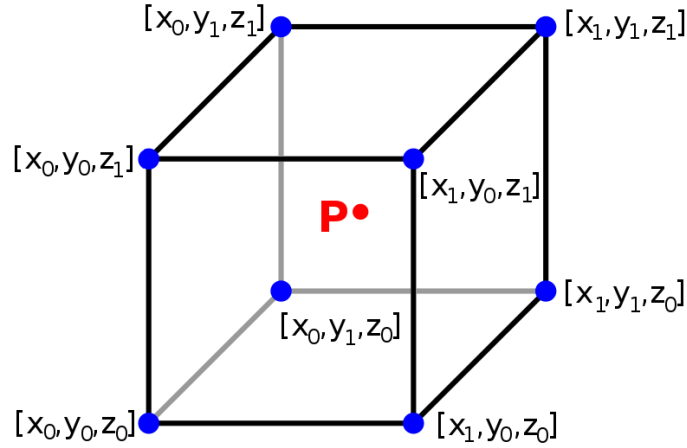
V rovnici 7.3 uvedená veličina \mathbf{v}_{LES} je určena z polí rychlosti proudění, která jsou jedním z výstupů modelu CLMM. Tato pole jsou dána svými hodnotami v jednotlivých uzlových bodech výpočetní sítě. Jelikož se částice v LDM nepohybují po uzlových bodech, ale v celém prostoru, je potřeba hodnoty těchto polí v místě částice určit pomocí interpolace.

Intepolačních schémat je v literatuře popsána celá řada. Jelikož bude v každém časovém kroku modelu LDM provedena interpolace alespoň jednou pro každou částici, kterých může být i několik milionů, je potřeba, aby toto schéma bylo dostatečně rychlé.

V současnosti jsou v LDM implementována dvě interpolační schémata - *metoda nejbližšího souseda* a *trilineární metoda*.

Metoda nejbližšího souseda je značně primitivní a její zařazení v LDM je spíše z testovacích důvodů. Tato metoda přiřadí každé částici hodnotu rychlosti v nejbližším uzlovém bodě.

Trilineární metoda bude popsána pomocí obrázku 7.3.



Obrázek 7.3: Trilineární interpolace - geometrie.

Hodnota veličiny V v bodě P je určena následující posloupností výpočtů:

$$x_d = (x - x_0)/(x_1 - x_0)$$

$$y_d = (y - y_0)/(y_1 - y_0)$$

$$z_d = (z - z_0)/(z_1 - z_0)$$

$$c_{00} = V[x_0, y_0, z_0] \cdot (1 - x_d) + V[x_1, y_0, z_0] \cdot x_d$$

$$c_{10} = V[x_0, y_1, z_0] \cdot (1 - x_d) + V[x_1, y_1, z_0] \cdot x_d$$

$$c_{01} = V[x_0, y_0, z_1] \cdot (1 - x_d) + V[x_1, y_0, z_1] \cdot x_d$$

$$c_{11} = V[x_0, y_1, z_1] \cdot (1 - x_d) + V[x_1, y_1, z_1] \cdot x_d$$

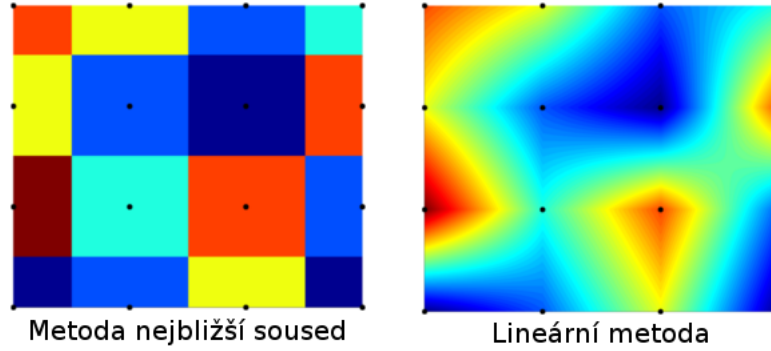
$$c_0 = c_{00} \cdot (1 - y_d) + c_{10} \cdot y_d$$

$$c_1 = c_{01} \cdot (1 - y_d) + c_{11} \cdot y_d$$

$$V[P] = c_0 \cdot (1 - z_d) + c_1 \cdot z_d \quad (7.4)$$

Trilineární metoda je prvního řádu přesnosti. Rozdíl obou metod je názorně vidět na obrázku , kde jsou zobrazeny výsledky interpolace metodou nejbližšího souseda a lineární interpolací na dvou-rozměrné mřížce.

Drobnou komplikací v implementaci interpolačních schémat je použití posunuté mřížky tak, jak byla popsána v kapitole 5. Pro každou složku pole rychlosti je totiž potřeba samostatně určit, v jaké buňce se částice vyskytuje.



Obrázek 7.4: Výsledky dvou interpolačních metod na 2D mřížce. Hodnoty jsou zadány v bodech zobrazených černou tečkou.

7.1.5.2 Subgridní model

Subgridní model pro LDM vychází z prací Thomsona[20] a Weila et al.[22]

Thomson odvodil pro stochastický Lagrangeovský model vyjádření rychlosti \mathbf{v}_L z rovnice 7.1 ve tvaru Langevinovy rovnice

$$d\mathbf{v}_L = \mathbf{a}(\mathbf{v}_L, \mathbf{x}, t)dt + \mathbf{b}(\mathbf{v}_L, \mathbf{x}, t)d\boldsymbol{\xi}, \quad (7.5)$$

kde $d\boldsymbol{\xi}$ je Gaussovský bílý šum. Člen s \mathbf{b} je zvolený tak, aby odpovídal Lagrangeovské strukturální funkci v inerciální podoblasti:

$$\mathbf{b} = (C_0\epsilon)^{1/2}, \quad (7.6)$$

kde C_0 je konstanta, jejíž velikost Thomson určil jako $C_0 = 4 \pm 2$ a ϵ je rychlost disipace subgridní turbulentní energie. Tvar \mathbf{a} odvodil Thomson z předpokladu takzvané „*well mixed*“ podmínky, která říká, že pokud jsou částice v nějaké oblasti dobře promíchané, tak i dobře promíchané zůstanou. Hustotu pravděpodobnosti rozložení částic v prostoru označíme $g(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t)$. Její vývoj je dán Fokkerovou-Plankovou rovnicí. Za platnosti *well mixed* podmínky nelze rozlišit mezi Lagrangeovskou hustotou pravděpodobnosti g_L a Eulerovskou hustotou pravděpodobnosti g_E , která je známá nebo předpokládaná. Thomson ukazuje, že člen \mathbf{a} z rovnice 7.5 je možné získat použitím g_E v Fokkerově-Plankově rovnici. Podrobnosti odvození je možné najít zde [20], [2] i zde [22].

Weil et al. použít tento Thomsonův přístup k odvození vztahů pro subgridní Lagrangeovský model uvnitř LES. Rovnici 7.1 přepsal

do tvaru 7.3 a pro \mathbf{v}_{SGS} odvodil vztah

$$d\mathbf{v}_{\text{SGS}} = -f_s \frac{1}{2} \frac{C_0 \epsilon \mathbf{v}_{\text{SGS}}}{\sigma_{\text{SGS}}^2} dt + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sigma_{\text{SGS}}^2} \frac{d\sigma_{\text{SGS}}^2}{dt} \mathbf{v}_{\text{SGS}} + \frac{\partial \sigma_{\text{SGS}}^2}{\partial \mathbf{x}} \right) dt + (f_s C_0 \epsilon)^{1/2} d\boldsymbol{\xi}, \quad (7.7)$$

kde f_s je koeficient, který určuje, že není potřeba modelovat celou Lagrangeovskou rychlost \mathbf{v}_L , jelikož jedna její část \mathbf{v}_{LES} je již určena LES modelem. Pro varianci subgridní rychlosti σ_{SGS}^2 platí vztah

$$\sigma_{\text{SGS}}^2 = \frac{2}{3} e, \quad (7.8)$$

kde e je subgridní turbulentní kinetická energie daná vztahem

$$e = \left(\frac{\nu_t}{C_k l} \right)^2, \quad (7.9)$$

kde ν_t je turbulentní viskozita vypočítávaná modelem CLMM, $C_k = 0,1$ je konstanta a jako směšovací délka l se bere

$$l = (\Delta_x \cdot \Delta_y \cdot \Delta_z)^{1/3}, \quad (7.10)$$

kde Δ_x , Δ_y a Δ_z je rozlišení výpočetní mřížky CLMM. Pro rychlost disipace ϵ pak platí

$$\epsilon = C_e \frac{e^{3/2}}{l}, \quad (7.11)$$

kde $C_e = 0,93$ je konstanta.

Parametrizace koeficientu f_s je dána vztahem

$$f_s = \frac{\langle \sigma_{\text{SGS}}^2 \rangle}{\langle \sigma_{\text{LES}}^2 \rangle + \langle \sigma_{\text{SGS}}^2 \rangle}, \quad (7.12)$$

kde $\langle \bullet \rangle$ znamená průměr v horizontální rovině a variance LES rychlostí σ_{LES}^2 je dána vztahem

$$\sigma_{\text{LES}}^2 = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 (v_{\text{LES}i} - \langle v_{\text{LES}i} \rangle)^2. \quad (7.13)$$

První člen v rovnici 7.7 je viskozí člen, druhý člen dává do souvislosti rychlost částice a subgridní turbulentní kinetickou energii a poslední člen má charakter náhodných fluktuací.

7.1.5.3 Integrační schéma

Při numerickém řešení diferenciální rovnice ve tvaru 7.1 je nutné postupovat podle určitého numerického schématu. Takovýchto schémat existuje velké množství. V LDM byly implementovány celkem čtyři metody - *explicitní Eulerova metoda* (EE), *Heunova metoda* (HE), *Adamsova-Bashforthova metoda 2. stupně* (AB2) a *metoda Runge-Kutta 3. stupně*. Všechny tyto metody jsou v literatuře velice dobře popsány včetně jejich odvození (např. zde [11]). Zde se omezíme pouze na jejich stručné představení.

Předpis explicitní Eulerovy metody pro rovnici 7.1 je

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \mathbf{v}(\mathbf{x}_n, t_n) \cdot h, \quad (7.14)$$

kde \mathbf{x}_{n+1} je pozice částice v dalším časovém kroce, \mathbf{x}_n je aktuální pozice částice a h je délka časového kroku. Tato metoda je 1. řádu přesnosti.

Heunova metoda, 2. řádu přesnosti, je dána předpisem

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{v}(\mathbf{x}_n, t_n) \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{v}(\mathbf{x}_n + h\mathbf{k}_1, t_n + h) \end{aligned}$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \cdot h. \quad (7.15)$$

Adamsova-Bashforthova metoda 2. stupně, která je také 2. řádu přesnosti, je určena předpisem

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{1}{2}[3\mathbf{v}(\mathbf{x}_n, t_n) + \mathbf{v}(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1})] \cdot h. \quad (7.16)$$

Poslední implementovaná metoda, Runge-Kutta 3. stupně, dána předpisem

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{v}(\mathbf{x}_n, t_n) \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{v}(\mathbf{x}_n + \frac{1}{2}h\mathbf{k}_1, t_n + \frac{1}{2}h) \\ \mathbf{k}_3 &= \mathbf{v}(\mathbf{x}_n - h\mathbf{k}_1 + 2h\mathbf{k}_2, t_n + h) \end{aligned}$$

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_1 + 4\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) \cdot h, \quad (7.17)$$

je třetího řádu přesnosti.

Stejně jako u interpolačního schématu je i zde důležitý požadavek na rychlost dané metody, jelikož se integrační schéma použije v každém kroku jednou pro každou částici, kterých, jak již bylo uvedeno, může být i několik milionů. Tento požadavek jde proti požadavku na přesnost, neboť přesnější metody bývají pomalejší.

Byl proveden test časové náročnosti jednotlivých schémat, jehož výsledky jsou uvedeny v části 7.3.

7.1.5.4 Okrajové schéma a překážky

V LDM jsou implementována základní schémata popisující chování částic, které překročí výpočetní doménu, případně narazí do pevné překážky.

Pokud částice přejde jakoukoli stěnou výpočetní oblasti kromě spodní, je ze souboru částic vymazána. V případě překročení spodní stěny si uživatel modelu může vybrat z následujících možností - částice se odrazí, částice se znehybní nebo se částice odebere z výpočtů.

V případě, že částice narazí na překážku, má uživatel modelu stejné možnosti jako v případě překročení spodní stěny - částici odrazit, znehybnit nebo vymazat.

Tato schémata jsou sice vcelku jednoduchá, ale pro současné využití modelu zcela dostačující. Díky modulárnímu pojetí modelu LDM je snadné přidat v budoucnu důmyslnější schémata, pokud budou vyžadována.

7.1.6 Možnosti datových výstupů

LDM skýtá široké možnosti nastavení výstupních datových souborů.

U všech výstupů je možné nastavit počáteční a koncový čas ukládání a časový krok ukládání v případě, že není zvolena možnost ukládání v každém kroku.

Základním typem výstupu z modelu je ukládání souboru s polohou všech částic. Tento výstup je velice vhodný pro další zpracování - tzv. *post-processing*. S polohou každé částice se ukládá také její jedinečné identifikační číslo. Je tak například možné sestavovat dopředné i zpětné trajektorie jednotlivých částic. Další z možností *post-processingu* je vytváření různých profilů koncentrací. Existuje několik možností, jak ze známých poloh jednotlivých částic určit koncentraci v konkrétním bodě.

Nejjednodušší metodou je vytvoření kontrolního objemu V v okolí bodu zájmu $[x, y, z]$ a koncentraci c spočítat podle vzorce

$$c[x, y, z] = \frac{N_V}{V}, \quad (7.18)$$

kde N_V je počet částic v objemu V . Tato metoda se v angličtině nazývá *cell method*. Nevýhodou této metody je nutnost použít malé objemy V a velký počet částic.

Další možností jsou takzvané *kernel methods*, detailně popsané např. zde [21]. Koncentrace je v tomto případě určena vztahem

$$c[x, y, z] = \sum_{i=1}^N \frac{K(r_x, r_y, r_z)}{h_{xi}h_{yi}h_{zi}}, \quad (7.19)$$

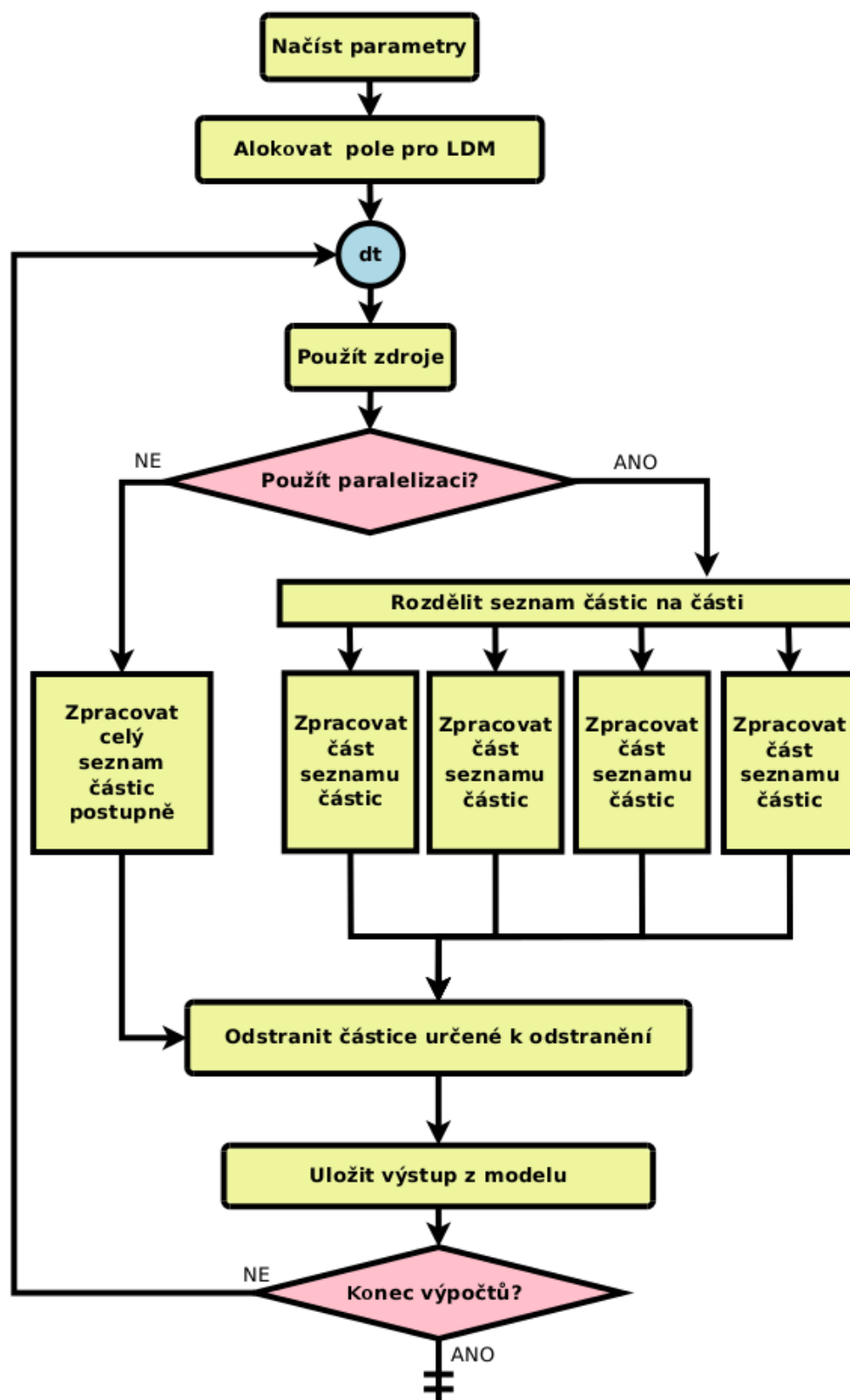
kde se sčítání provádí přes všechny částice, $r_x = (x_i - x)/h_{xi}$, kde x_i je poloha částice (analogické vztahy platí i pro r_y a r_z), K je takzvaná jádrová funkce přiřazená každé částici, která splňuje podmínku

$$\frac{1}{h_{xi}h_{yi}h_{zi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K \, dx dy dz = 1 \quad (7.20)$$

a parametry h_{xi} , h_{yi} a h_{zi} určují stupeň vyhlazování v jednotlivých směrech x , y a z a jsou specifické pro každou částici. Za K se často volí Gaussova funkce, ale velmi často jsou používány i jiné možnosti. Pro svou vyšší výpočetní náročnost se tato metoda hodí především pro post-processing.[21]

Do modelu LDM byla implementována možnost pomocí cell metody online vypočítávat a ukládat některé profily koncentrací. Jsou to tři základní typy - *2D horizontální profil*, *2D vertikální profil* a *1D vertikální profil*. Tyto druhy výstupů budou názorně ukázány v kapitole 9. Uživatel může volit rozlišení jednotlivých profilů, velikost kontrolních objemů i další parametry. Počet vypočítávaných profilů opět není omezen.

7.2 Diagram kódu



Obrázek 7.5: Zjednodušený diagram kódu modelu LDM.

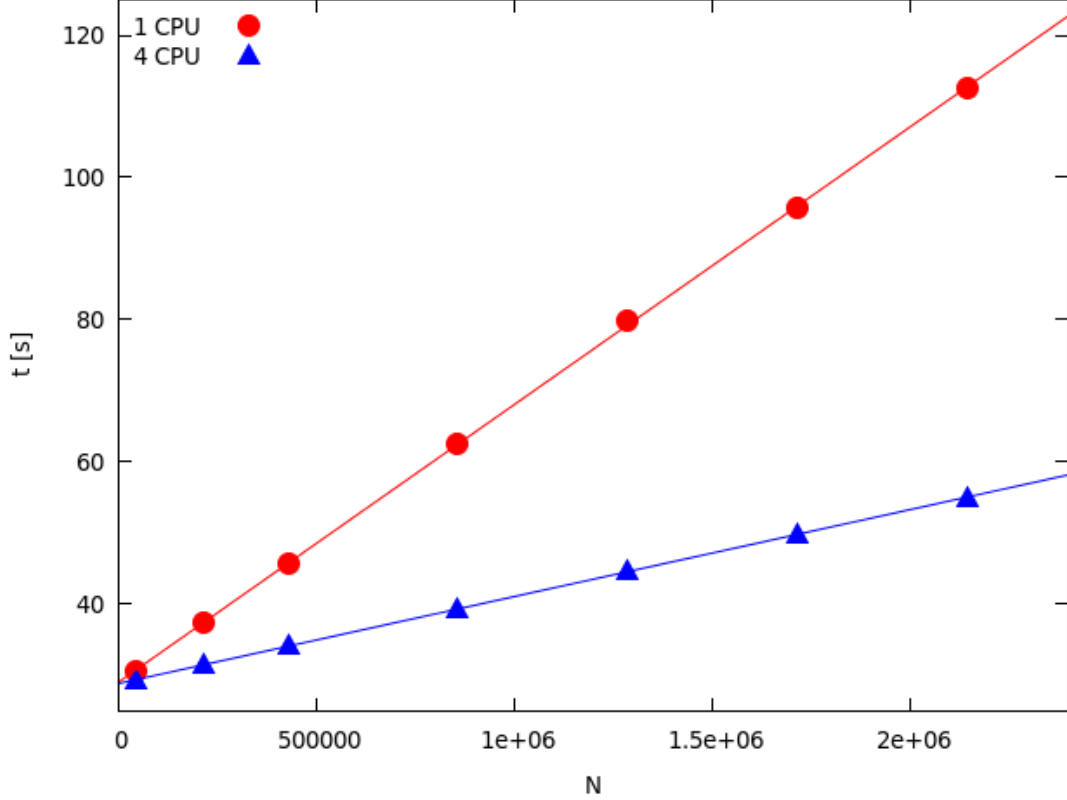
Jak již bylo řečeno, model LDM pracuje uvnitř modelu CLMM. Na obrázku 7.5 je zobrazený zjednodušený diagram kódu modelu LDM. Celý proces začíná načtením parametrů modelu z externích souborů. Následuje alokování datových polí a příprava na výpočet. Pak začne výpočet modelu CLMM, který určuje velikost časového kroku dt . V každém kroku modelu CLMM dojde také k jednomu kroku modelu LDM. Každý krok modelu LDM začíná použitím zdrojů znečištění a tedy přidáním nových částic do výpočetní domény. Poté následuje výpočet pro každou jednotlivou částici. Podle toho, jestli uživatel zvolil využití paralelizace, a jestli jsou pro paralelizaci vhodné podmínky, provádějí se výpočty buď postupně vždy pouze pro jednu částici, nebo se zpracovává několik částic najednou. Struktura výpočtů pro každou částici je následující: napřed se z pole rychlosti z CLMM interpoluje rychlost do místa částice, následně se z rovnice 7.7 určí subgridní rychlost částice, poté se integrací rovnice 7.3 získá nová poloha částice, nakonec se kontroluje, jestli částice neopustila s novou pozicí výpočetní doménu, nebo jestli nenarazila do překážky a provedou se příslušná opatření podle nastavení modelu (například se označí částice, které mají být vymazané ze seznamu). Poté, kdy se zpracuje poslední částice, projde se znovu celý seznam částic a vymažou se ty, které k tomu byly určeny. Nakonec se uloží výstupní datové soubory a pokračuje se dalším krokem modelu CLMM. Výpočet končí s koncem běhu modelu CLMM.

Jak je z obrázku 7.5 patrné, jediné části modelu, které nejsou paralelizované, jsou přidávání a odebrání částic a ukládání výstupů. Přidání a odebrání částic bohužel paralelizovat není možné kvůli vlastnostem spojového seznamu. Naštěstí tyto úkony nejsou výpočetně náročné. Můžeme tedy očekávat vcelku vysokou efektivitu paralelizace.

7.3 Testy výkonu

Byl proveden test k určení efektivity paralelizace. Test spočíval v opakovaném výpočtu testovací úlohy s rozdílným nastavením LDM. Výpočty probíhaly s různými počty částic N vždy pětkrát bez použití paralelizace a pětkrát za použití paralelizace a sledoval se celkový čas t_N běhu výpočetní části modelu. Velikost výpočetní sítě modelu CLMM byla 150 x 100 x 50 uzlů (tj. celkem 750 000 uzlů). Celkem bylo vždy provedeno 100 časových kroků. Výpočty profilů koncent-

rací a všechny výstupy z modelu byly vypnuty. Průměr naměřených hodnot pro jednotlivé počty částic je zobrazený v grafu 7.6. Data jsou proložena přímkou lineární regrese.



Obrázek 7.6: Závislost doby výpočtu testovací úlohy na počtu částic pro paralelizovaný a neparalelizovaný běh.

Z naměřených hodnot můžeme vypočítat *zrychlení* S modelu LDM definované vztahem

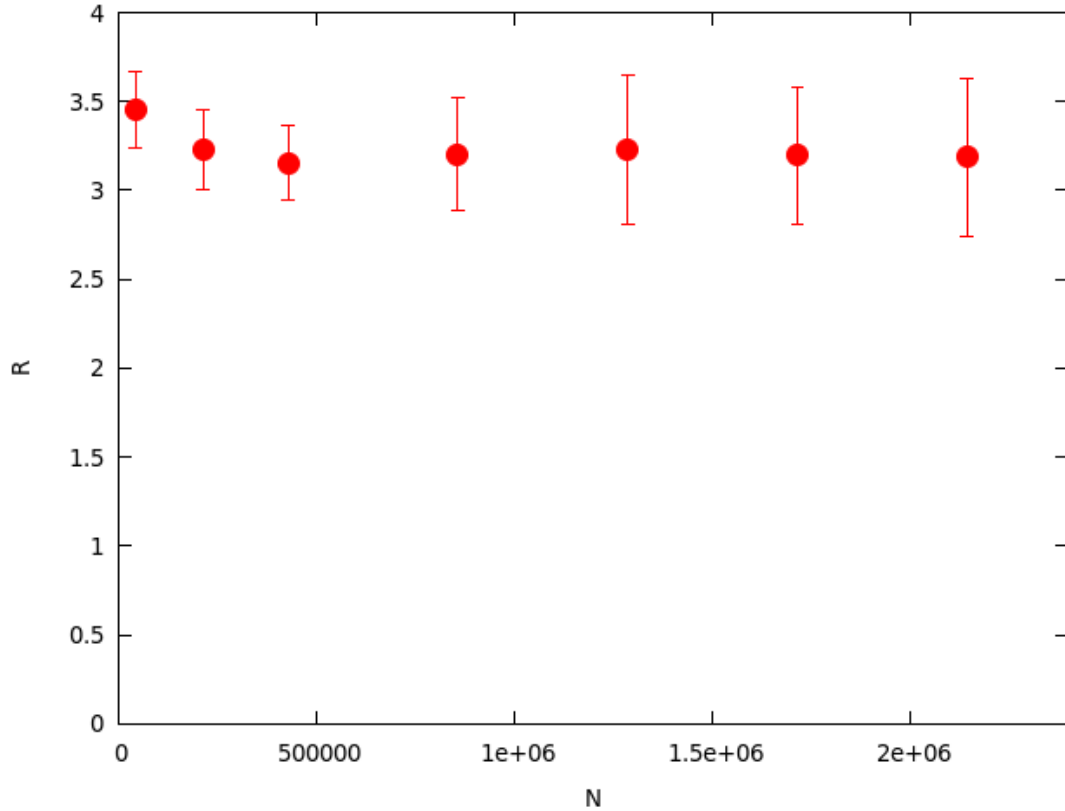
$$S(N) = \frac{t_{N,1\text{CPU}} - t_{N=0}}{t_{N,4\text{CPU}} - t_{N=0}}, \quad (7.21)$$

kde $t_{N,1\text{CPU}}$ je doba běhu výpočtu v závislosti na počtu částic N bez použití paralelizace, $t_{N,4\text{CPU}}$ je doba běhu s paralelizací a $t_{N=0}$ je doba běhu modelu CLMM bez částic. Hodnoty zrychlení $S(N)$ jsou zobrazeny v grafu 7.7.

Průměrná naměřená hodnota zrychlení běhu modelu LDM je

$$S = (3, 2 \pm 0, 1).$$

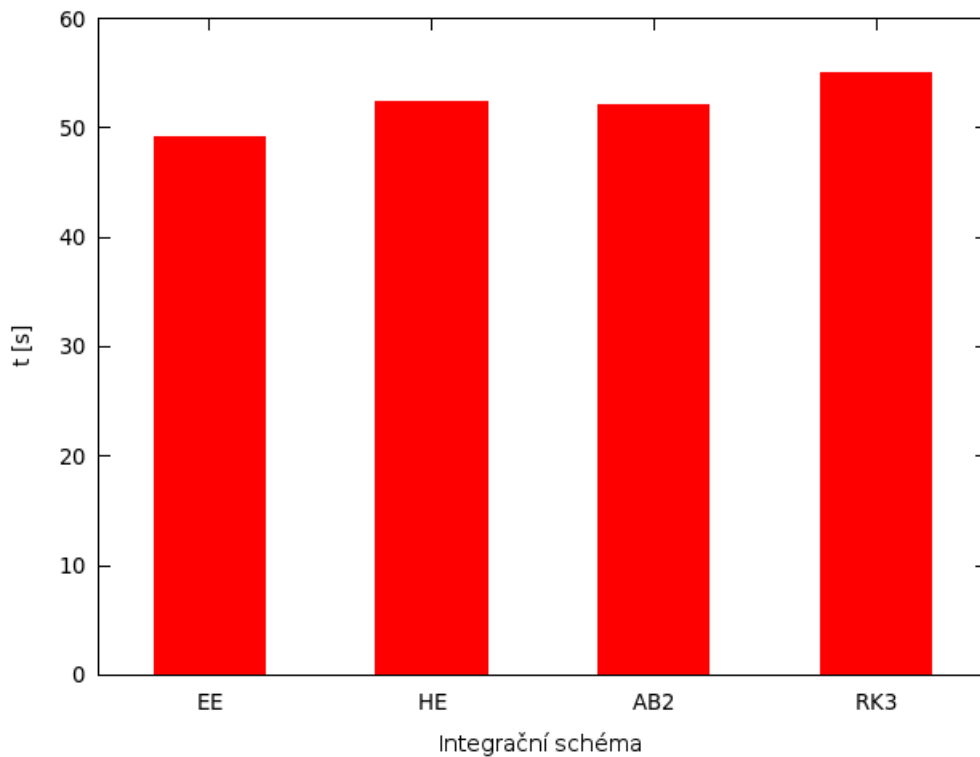
Další test se zaměřil na výkon jednotlivých integračních schémat. Byl použit stejný příklad jako v předchozím testu. Pro $N = 2\,145\,000$



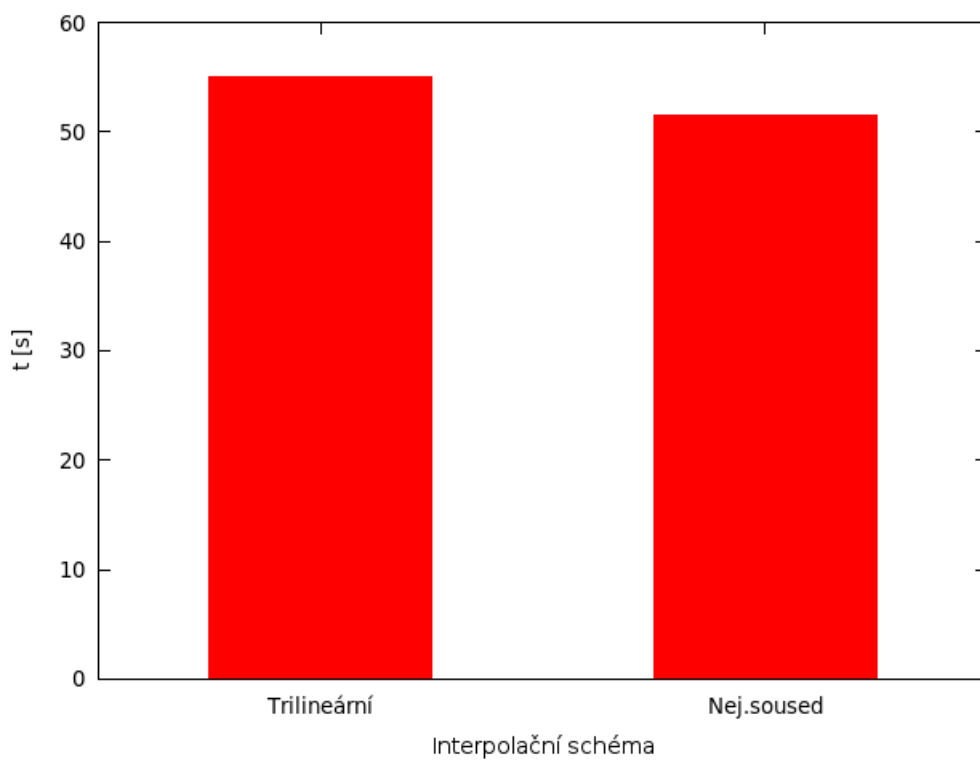
Obrázek 7.7: Zrychlení modelu LDM v závislosti na počtu částic.

bylo provedeno vždy pět výpočtů s postupným použitím jednotlivých integračních schémat. Průměr z naměřených časů je zobrazen na grafu 7.8.

V dalším testu byla zkoumána výkonnost obou interpolačních schémat. Pro obě schémata proběhly výpočty stejného příkladu jako v předchozím případě. V obou případech byla použita integrační metoda RK3. Výsledné časy jsou zobrazeny v grafu 7.9.



Obrázek 7.8: Závislost doby výpočtu testovací úlohy na použité integrační metodě.



Obrázek 7.9: Závislost doby výpočtu testovací úlohy na použité interpolační metodě.

8. Validace modelu

Jak je vidět z předchozích kapitol, není Lagrangeovský dispersní model vůbec triviální. Je tedy nutné ověřit, že výsledky LDM jsou správné. V rámci tohoto ověření budou výsledky LDM zkoumány z několika pohledů:

- Stabilita modelu
- Splnění well mixed podmínky
- Porovnání s výsledky z větrného tunelu

Zbytek této kapitoly se jednotlivým bodům postupně věnuje.

8.1 Stabilita modelu

Jedním z nejzákladnějších požadavků na každý numerický model je, aby byl stabilní. Tento požadavek může znít jednoduše, ale jeho význam je zásadní. Model, který by byl v některých oblastech nebo konfiguracích nestabilní, je prakticky nepoužitelný.

LDM se v tomto ohledu ukazuje být stabilní. Bylo provedeno mnoho běhů modelu LDM s nejrůznější geometrickou konfigurací překážek, různou konfigurací zdrojů znečištění, s různým nastavením a s různým počtem částic a délkou výpočtu. Na obyčejném domácím PC probíhaly například výpočty s až přibližně 10 miliony částic s dobou trvání několik desítek hodin. Všechny výpočty dospěly do konce beze známky nestability v částicovém schématu. Některé výsledky z těchto výpočtů jsou dále uvedeny v kapitole 9.

8.2 Well mixed podmínka

Dalším základním požadavkem na Lagrangeovský dispersní model je plnění takzvané well mixed podmínky.[22] Jak již bylo poznamenáno v kapitole 7.1.5.2, Thomson[20] na základě tohoto předpokladu odvodil tvar základních rovnic lagrangeovských modelů. Je tedy přirozené požadovat od každého konkrétního modelu její splnění.

Well mixed podmínka říká, že částice, které byly původně rovnoměrně rozloženy, by tak měly zůstat. Testovací výpočet pro LDM probíhal následovně: v jedné polovině domény byly vypouštěny částice

s rovnoměrným vertikálním rozložením, částice byly následně přesunuty modelem do druhé části domény, která byla rozdělena na 50 vertikálních hladin, a v každém časovém kroce byl vypočten počet částic v jednotlivých hladinách.

Konečný modelový čas byl 3 600 s, celkem bylo provedeno přes 20 000 časových kroků s délkou průměrně 0,18 s. Počet částic v doméně byl přes 500 000.

Rozložení částic bylo vypočítáno v časech 900 s (15 minut), 1 800 s (30 minut), 2 700 s (45 minut) a 3 600 s (60 minut). Z počtu částic v jednotlivých hladinách N_i byla vypočtena *normalizovaná koncentrace* K_i v každé hladině podle vztahu

$$K_i = \frac{N_i}{N_{\text{avg}}}, \quad (8.1)$$

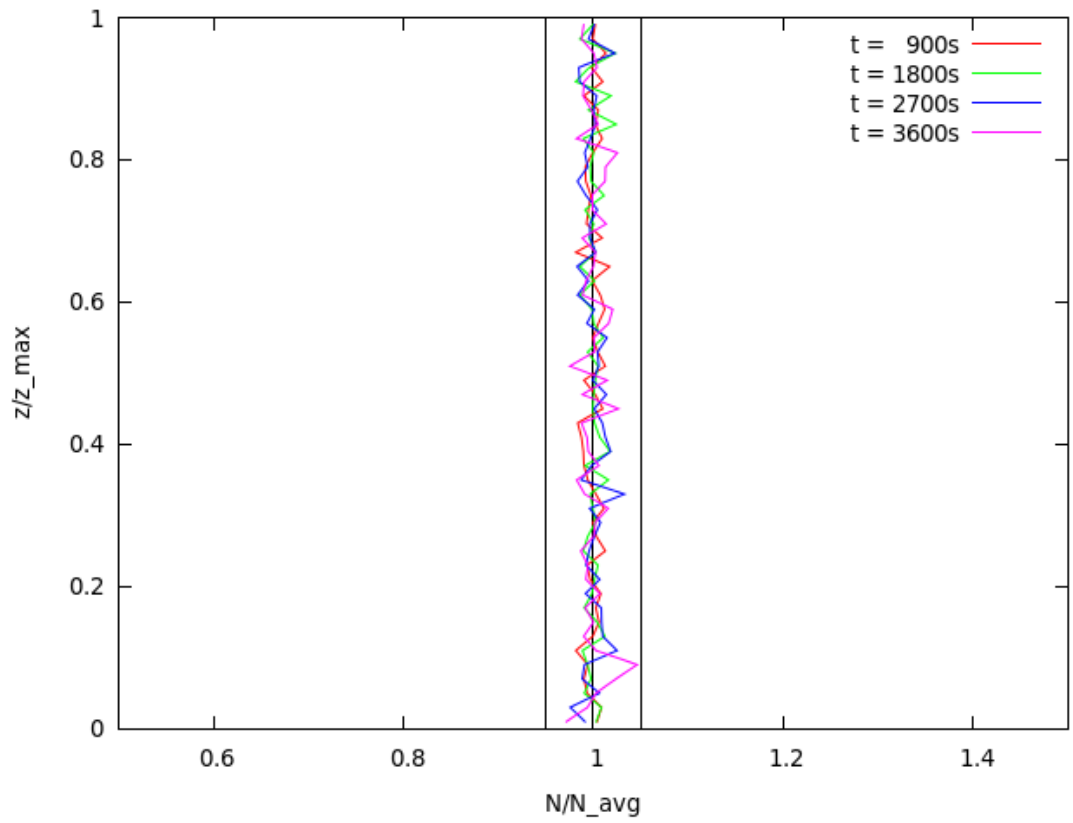
kde

$$N_{\text{avg}} = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^H N_i, \quad (8.2)$$

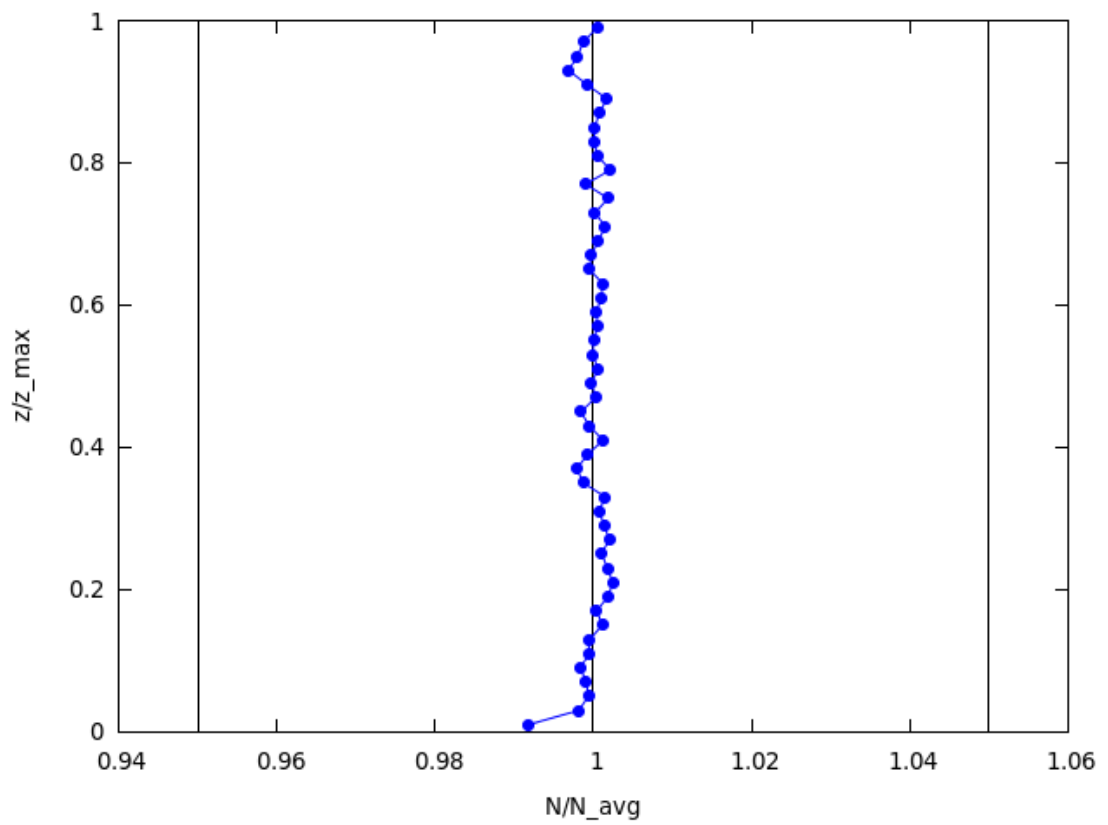
přičemž $H = 50$ je počet vertikálních hladin. Při splnění well mixed podmínky by mělo platit $N_i = 1$ pro všechna i . Naměřené hodnoty jsou zobrazeny na obrázku 8.1. Tři vertikální přímky na hodnotách $x = 1$, $x = 0,95$ a $x = 1,05$ znázorňují ideální rozložení a 5% odchylku.

Byla také vypočtena průměrná hodnota N_i mezi časy 900 s a 3 600 s. Výsledek je znázorněn na obrázku 8.2. Vertikální přímky opět znázorňují ideální rozložení a 5% odchylku.

Z výsledků je patrné, že rozložení částic není úplně ideální. Odchylka se však pohybuje pod hodnotou 5%. V případě delšího časového průměru je i výrazně nižší, což je pro současné použití modelu LDM dostačující.



Obrázek 8.1: Normalizovaná koncentrace.



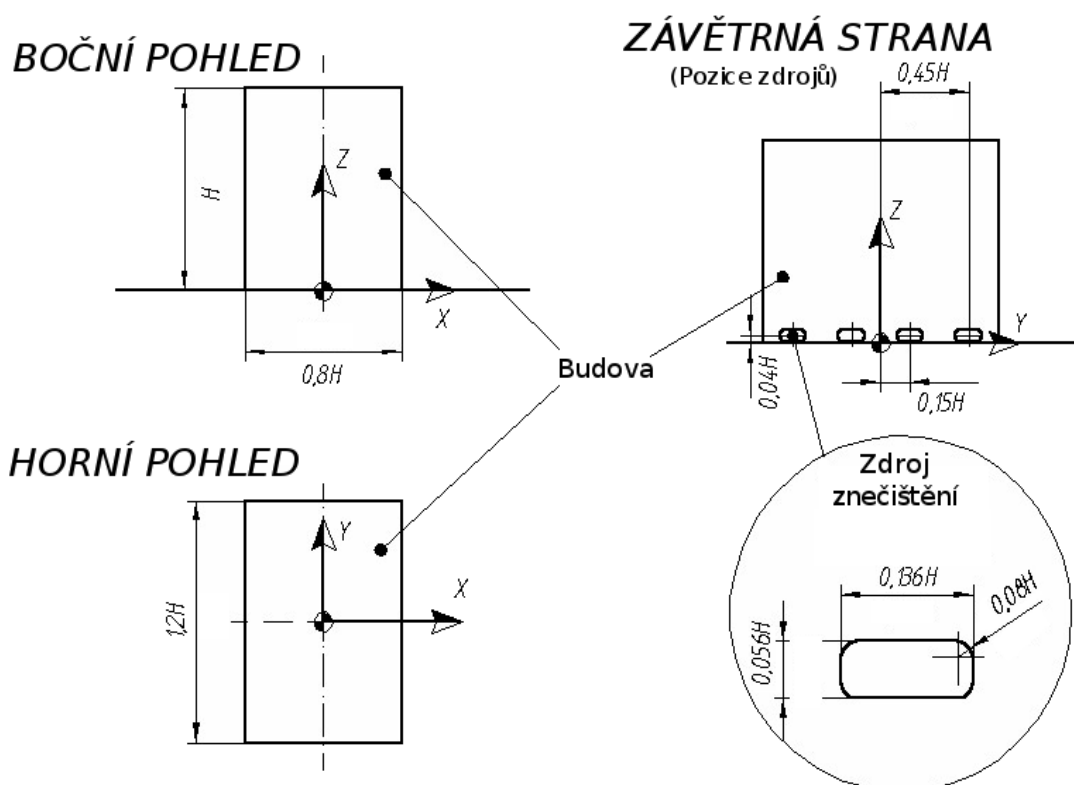
Obrázek 8.2: Průměrná normalizovaná koncentrace.

8.3 Porovnání s výsledky experimentu ve větrném tunelu

Vhodným nástrojem pro validaci numerických dispersních modelů jsou experimenty ve větrném tunelu. Pro validaci LDM byl vybrán soubor experimentů CEDVAL. Měření projektu CEDVAL proběhla ve větrném tunelu BLASIUS na Meteorologickém institutu Univerzity v Hamburku (Universität Hamburg Meteorologisches Institut). Výsledky jsou dostupné z webových stránek Meteorologického institutu.[10]

Ze sady experimentů byl vybrán příklad „Disperze okolo obdélníkové budovy“ s označením A1-5.

V experimentu A1-5 byly napřed změřeny parametry proudění okolo budovy tvaru kvádrů. Poté byly použity čtyři zdroje znečištění na závětrné straně budovy blízko země, které simulovaly emise z podzemní garáže. Geometrie budovy a zdrojů je znázorněna na obrázku 8.3. Výška budovy byla $H = 25m$, v modelovém měřítku pak $H = 125mm$.

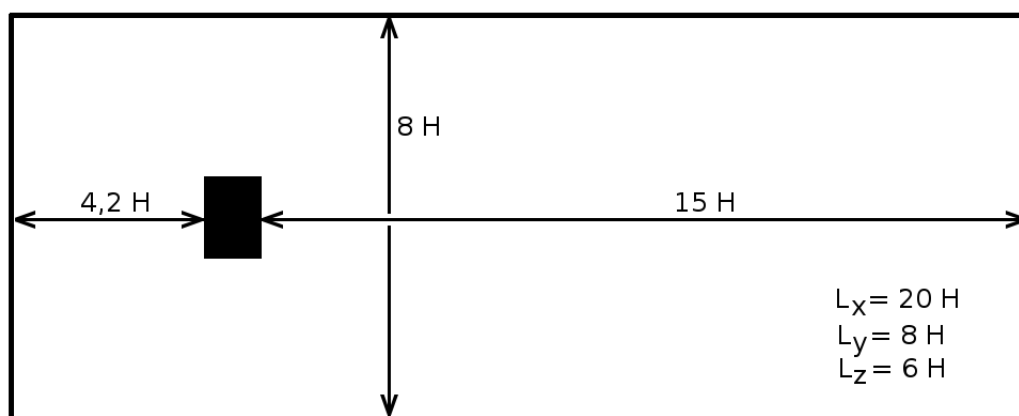


Obrázek 8.3: Geometrie experimentu CEDVAL A1-5. Upraveno podle: <http://www.mi.zmaw.de/>

Pole koncentrací naměřené ve větrném tunelu budou v závěru této kapitoly porovnány s výsledky získanými z běhu modelu LDM.

Důležitým parametrem numerických modelů proudění je velikost výpočetní domény a geometrické uspořádání experimentu. V příliš malé doméně nemá turbulence dostatek prostoru, aby se plně vyvinula. Velká doména klade na druhou stranu vyšší nároky na výpočetní výkon.

Nastavení domény pro LDM vychází z doporučení uvedených v literatuře[5]. Výsledné rozměry v jednotlivých dimenzích jsou $L_x = 20H$, $L_y = 8H$ a $L_z = 6H$. Geometrické uspořádání je znázorněno na obrázku 8.4.

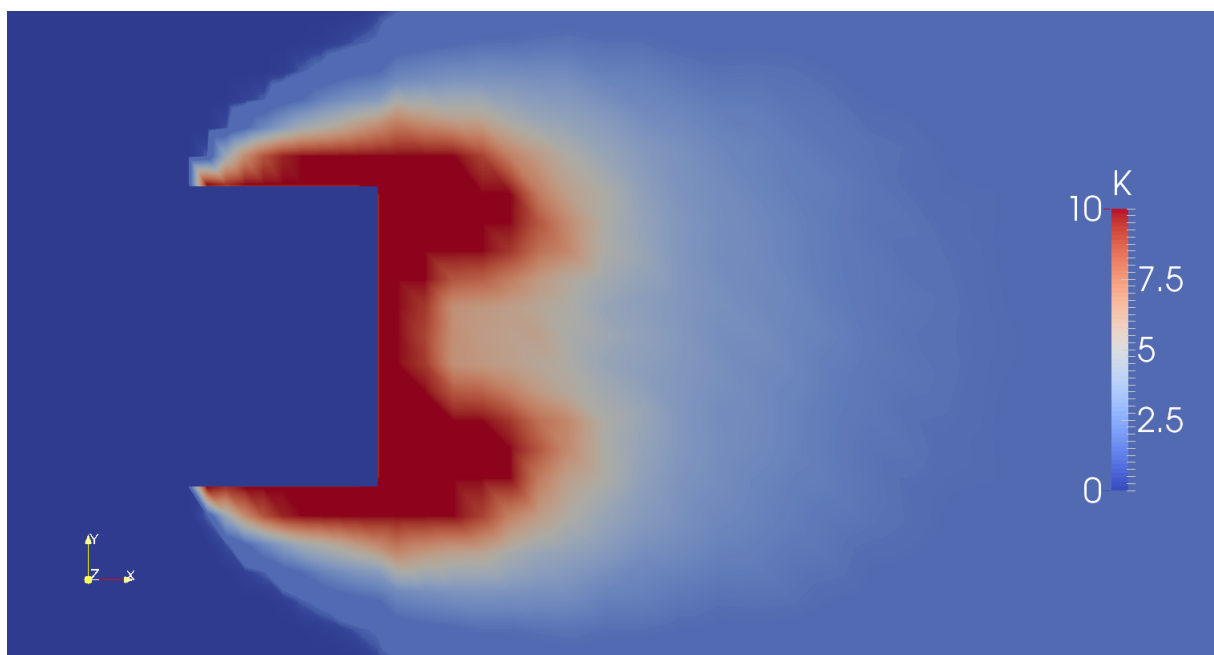


Obrázek 8.4: Geometrické uspořádání a velikost výpočetní domény pro validaci LDM.

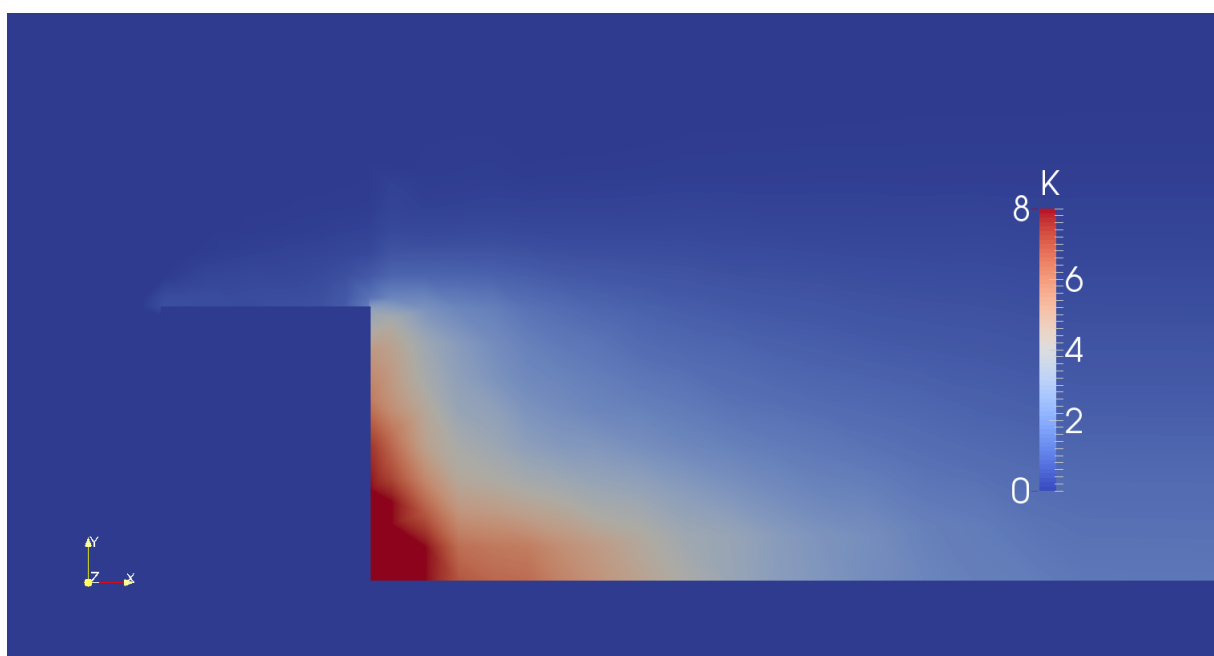
Pole koncentrací naměřená při experimentu CEDVAL jsou zobrazena na obrázcích 8.5 a 8.6. Naměřená data byla do roviny interpolována pomocí bilineární interpolace.

Pole koncentrací získaná modelem LDM jsou zobrazena na obrázcích 8.7 a 8.8. Tyto koncentrace byly získány zprůměrováním okamžitých koncentrací získaných z běhu modelu. Konečný modelový čas byl 7 200 s (2 hodiny) od začátku aktivity zdrojů.

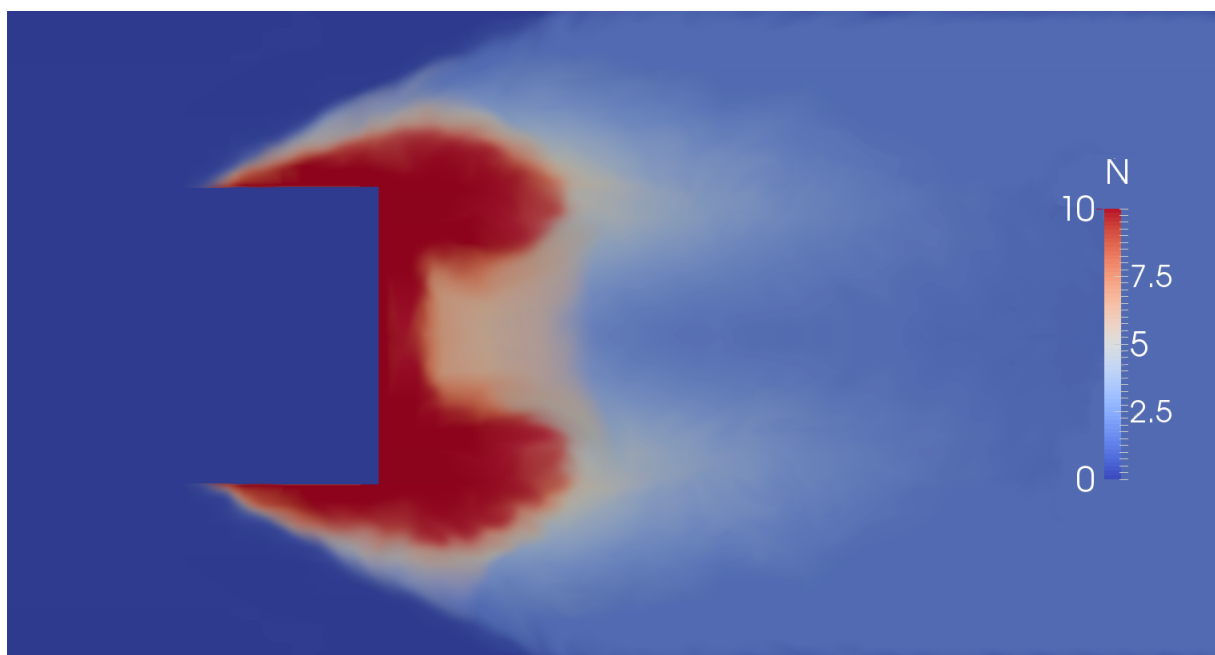
Porovnání dat z experimentu CEDVAL a z modelu LDM je provedeno na obrázcích 8.9 a 8.10.



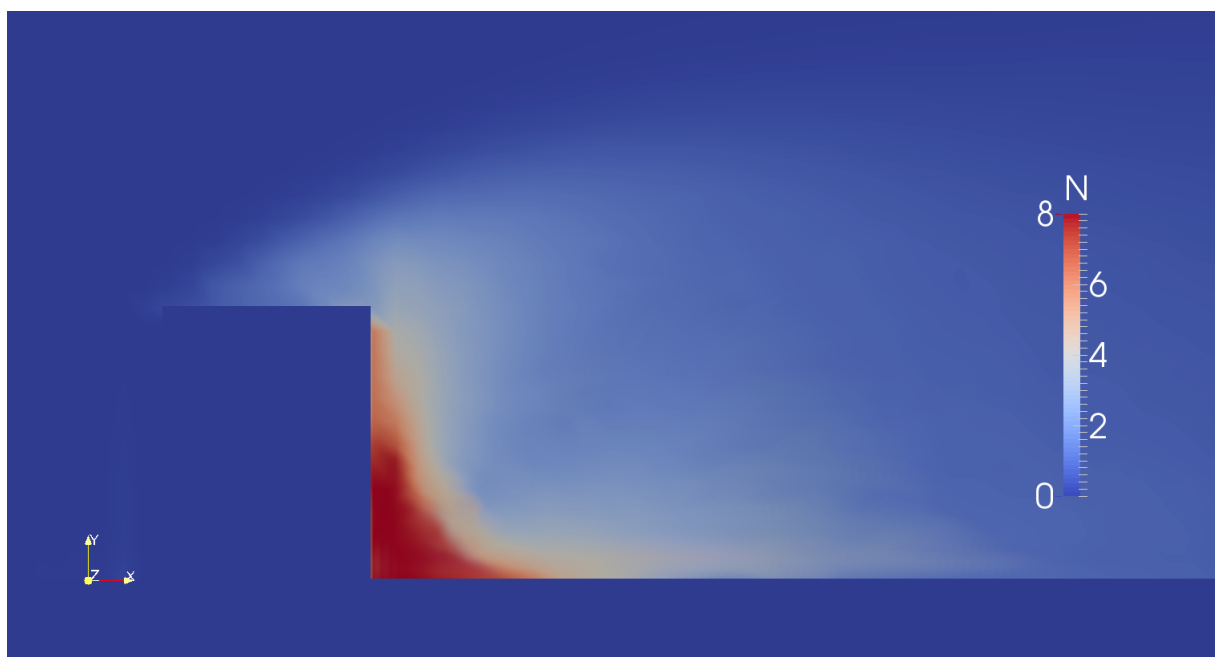
Obrázek 8.5: Koncentrace naměřená v experimentu CEDVAL A1-5. Horizontální řez: $z=2$ m



Obrázek 8.6: Koncentrace naměřená v experimentu CEDVAL A1-5. Vertikální řez: $y=0$.

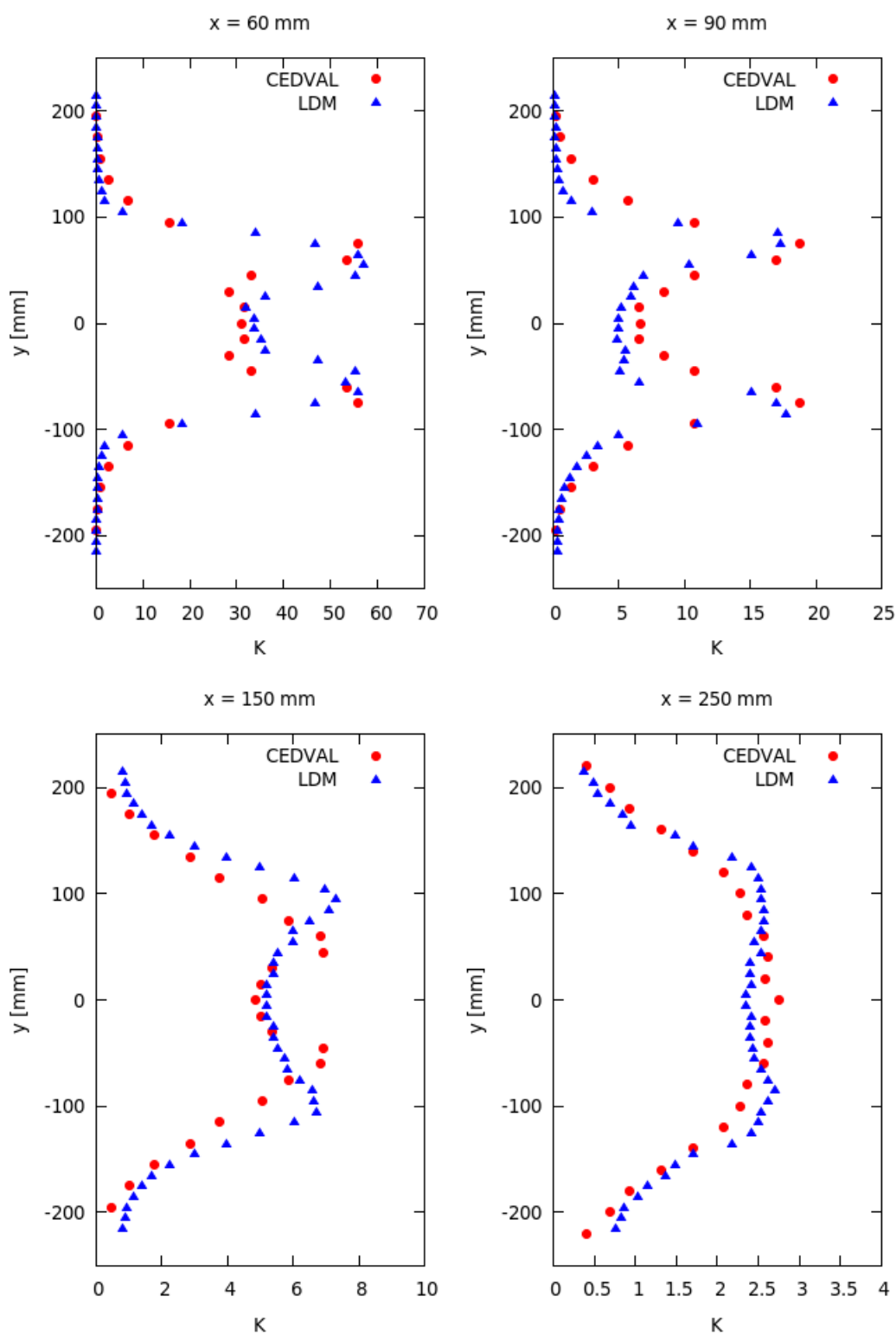


Obrázek 8.7: Koncentrace získaná modelem LDM. Horizontální řez: $z=2$ m



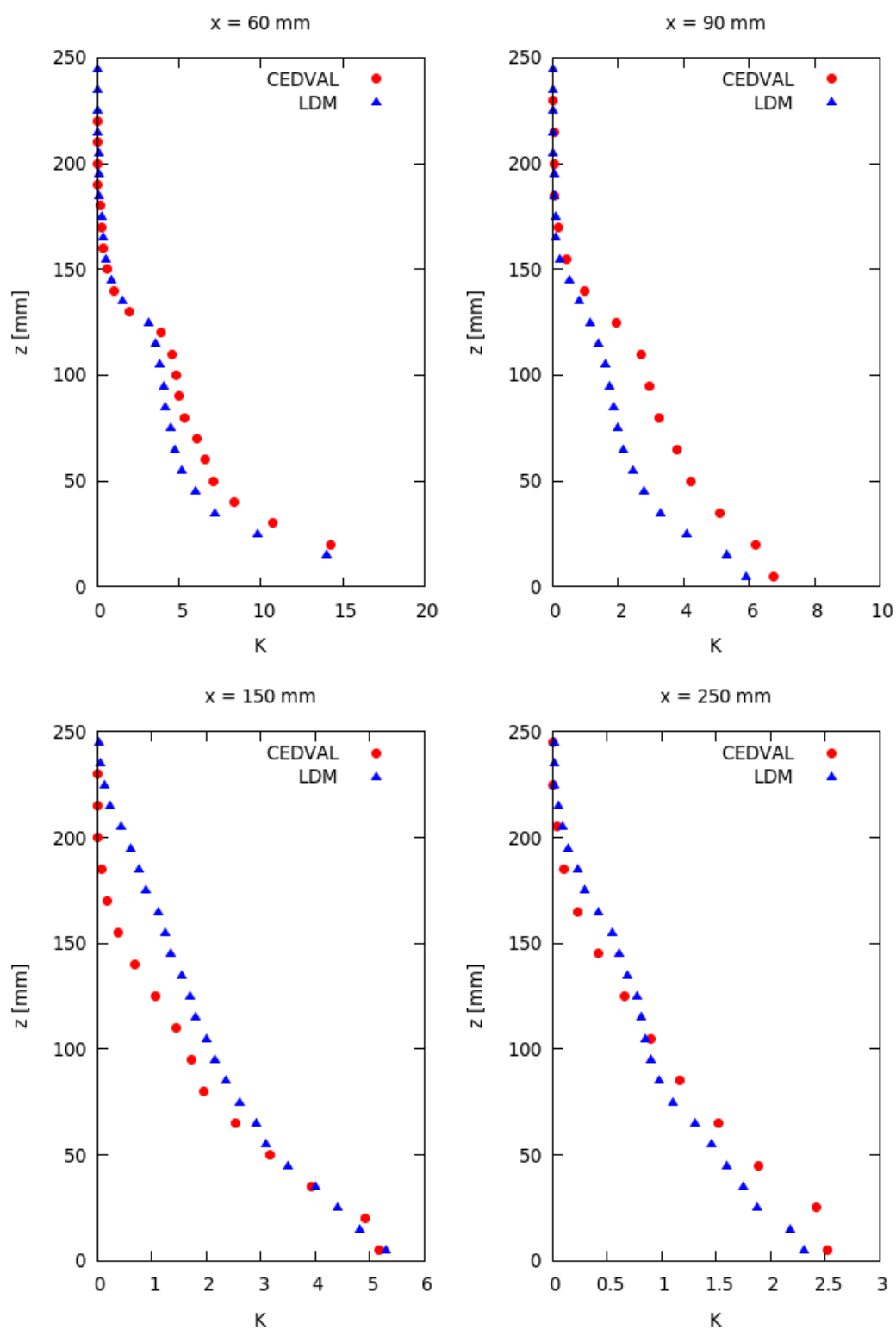
Obrázek 8.8: Koncentrace získaná modelem LDM. Vertikální řez: $y=0$.

Na obrázku 8.9 je provedeno srovnání horizontálního rozložení koncentrace z experimentu CEDVAL a z modelu LDM.



Obrázek 8.9: Srovnání dat z experimentu CEDVAL a z modelu LDM ($z=2$ m).

Na obrázku 8.10 je provedeno srovnání vertikálního rozložení koncentrace z experimentu CEDVAL a z modelu LDM.



Obrázek 8.10: Srovnání dat z experimentu CEDVAL a z modelu LDM ($z=2$ m).

Jak již bylo uvedeno, možností, jak vypočítat koncentraci z prostorového rozložení částic, je několik. Zde byla použita výše popsaná cell metoda. Koncentrace z LDM byla normovaná pomocí koncentrace naměřené v těsné blízkosti zdrojů znečištění a pomocí bilineární interpolace následně interpolována do plochy.

Z porovnání obrázků 8.5 s 8.7 a 8.6 s 8.8 je patrný shodný charakter polí koncentrací.

Na obrázcích 8.9 a 8.10 je vidět vcelku dobrá shoda modelu LDM s experimentem CEDVAL. O něco lepších výsledků dosahuje model blíže ke zdrojům znečištění. Na všech obrázcích je také vidět, že se v LDM vyskytují větší prostorové gradienty koncentrací.

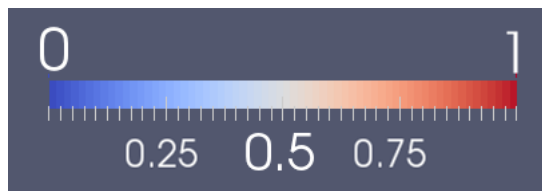
Horizontální rozložení koncentrací by mělo být symetrické podle osy y . Na obrázcích 8.7 a 8.9 je však možné pozorovat drobnou asymetrii dat z LDM. Tato asymetrie byla značně vyšší při použití polovičního výpočetního času (1 hodina). Je tedy možné předpokládat, že delším během modelu by došlo ještě k většímu vylepšení symetrie. Přesnost dosažená po 2 hodinách je však dostatečná.

Celkově vzato můžeme model LDM považovat za relativně přesný nástroj k popisu disperze okolo obdélníkové budovy v příkladu CEDVAL A1-5.

9. Výsledky z modelu LDM

Validace modelu byla provedena v kapitole 8. Hlavní motivací výsledků uvedených v této kapitole bylo otestovat stabilitu a chování LDM v různých podmínkách a za různého nastavení a také ukázat možnosti datových výstupů z modelu.

Jelikož absolutní hodnoty koncentrací nejsou pro potřeby této kapitoly podstatné, byla koncentrace na všech zde zobrazených rozloženíh normována podle určité, pro daný případ charakteristické, hodnoty. Měřítko takto normované koncentrace je zobrazeno na obrázku 9.1. Pro jednoduchost bude tato normovaná koncentrace ve zbytku kapitoly nazývána pouze koncentrací.



Obrázek 9.1: Měřítko normované koncentrace.

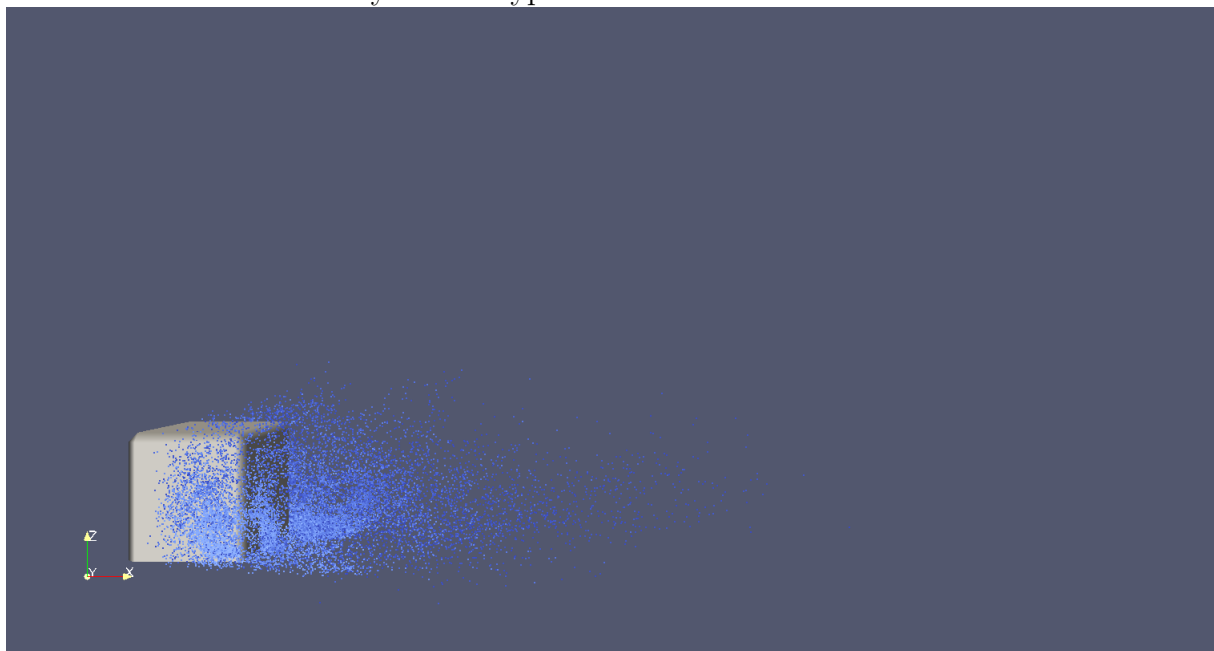
9.1 CEDVAL A1-5

Tento příklad byl použit při validaci modelu LDM v kapitole 8.3, kde jsou také uvedeny výsledky simulace. Zde uvedené výsledky byly získány s jiným nastavením modelů CLMM a LDM. Geometrie budovy a výpočetní oblasti je zobrazena na obrázku 8.3, respektive 8.4.

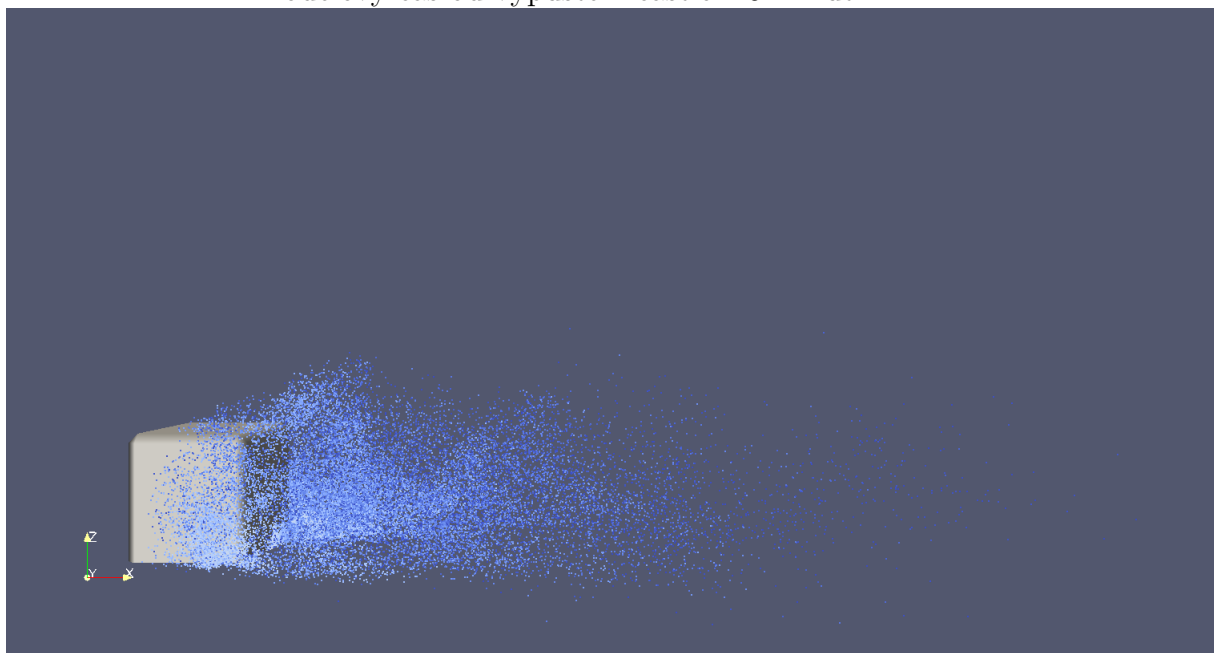
9.1.1 Pohyb částic v prostoru

Barva částic koresponduje s časem jejich vypuštění. Modré částice jsou nejstarší, červené nejmladší.

Modelový čas od vypuštění částic: 10 minut

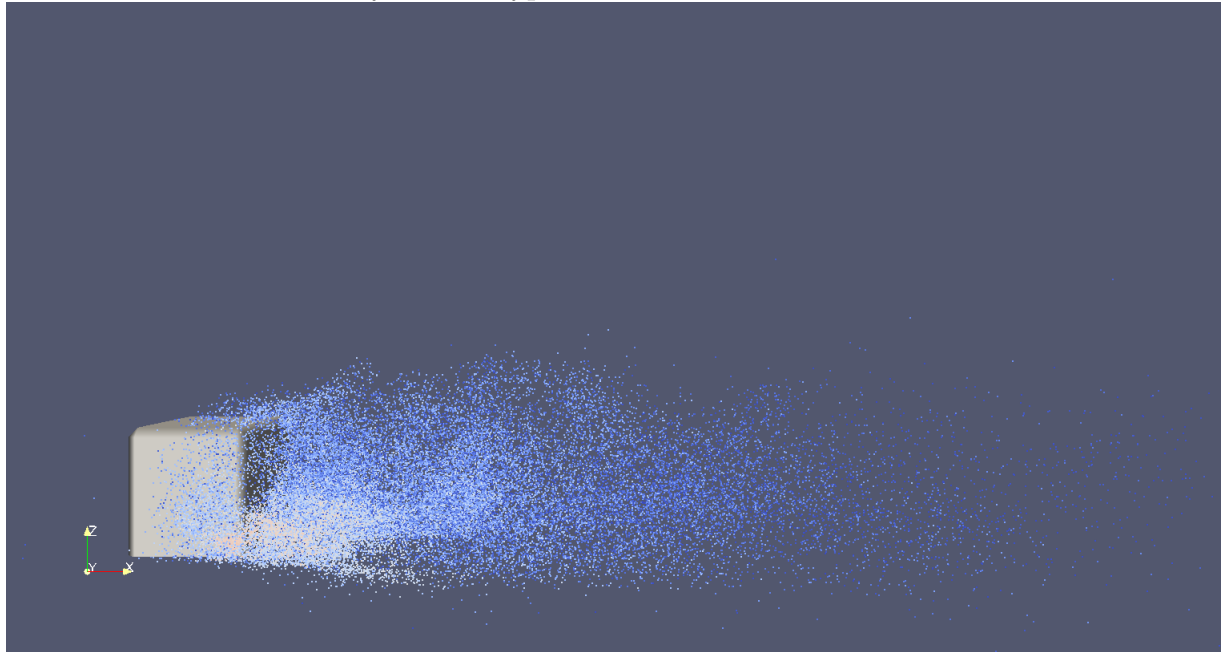


Modelový čas od vypuštění částic: 15 minut

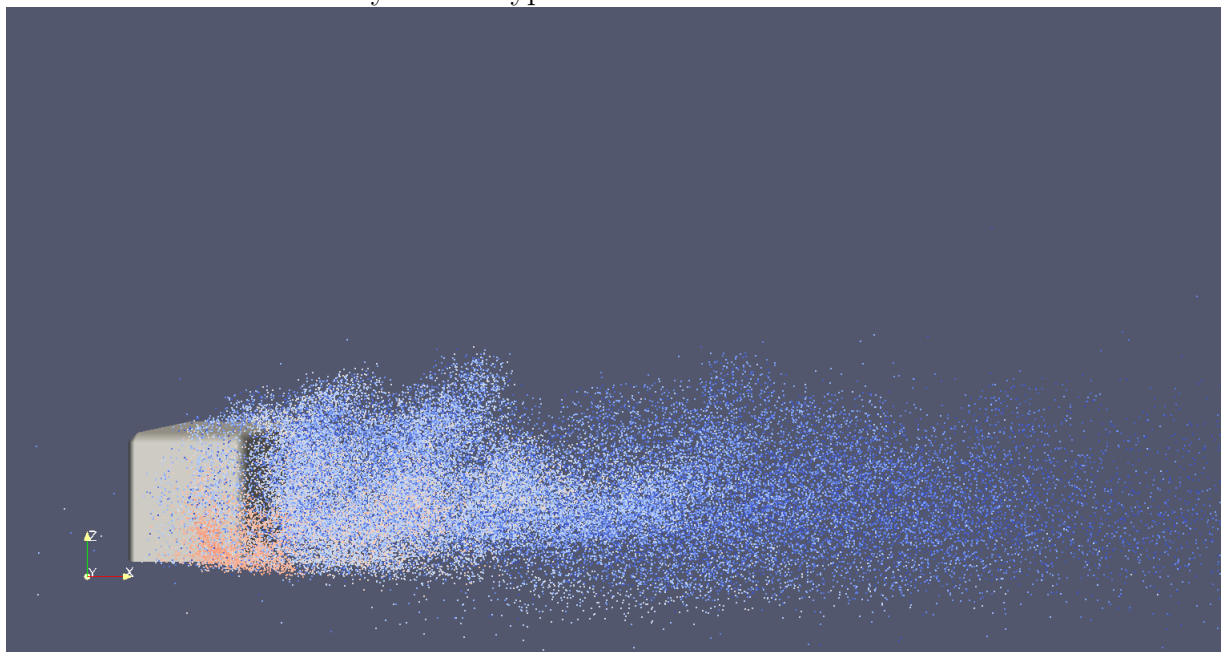


Obrázek 9.2: A1-5: Pohyb částic v prostoru.

Modelový čas od vypuštění částic: 20 minut

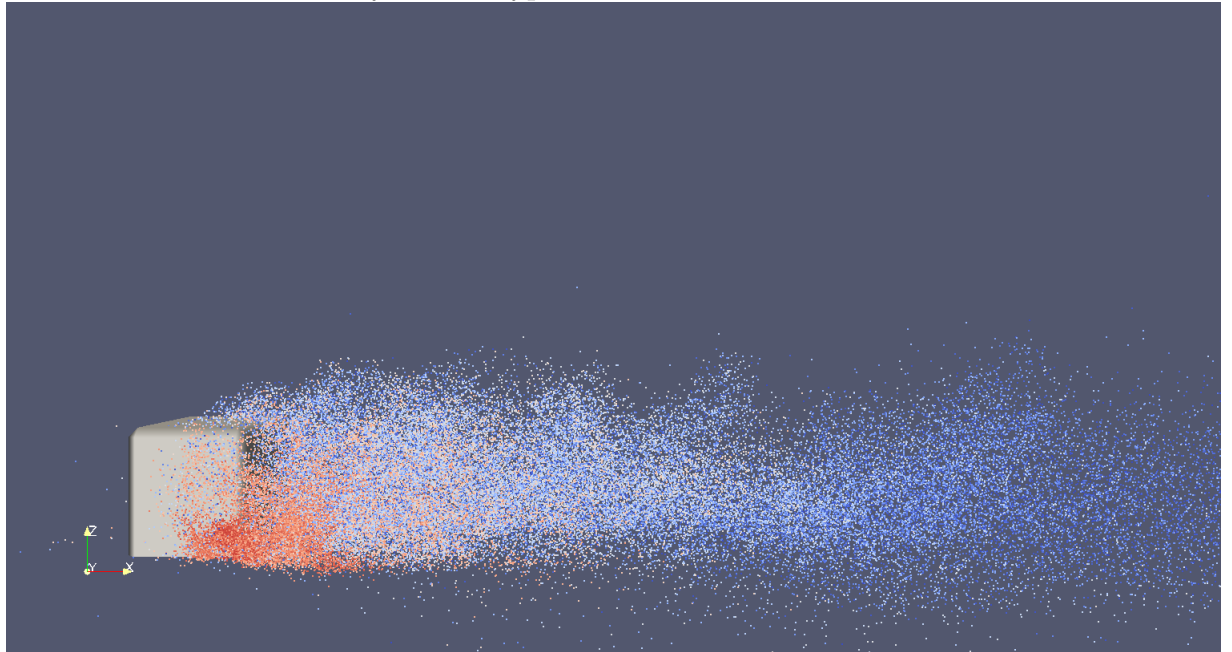


Modelový čas od vypuštění částic: 25 minut

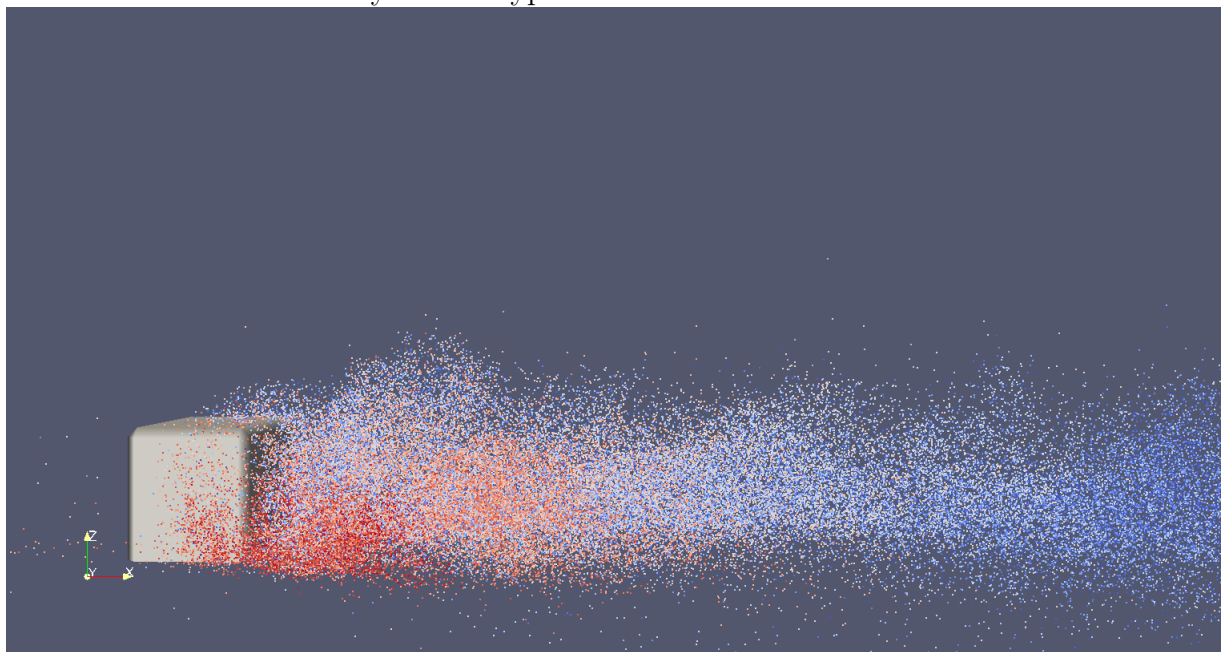


Obrázek 9.3: A1-5: Pohyb částic v prostoru.

Modelový čas od vypuštění částic: 30 minut



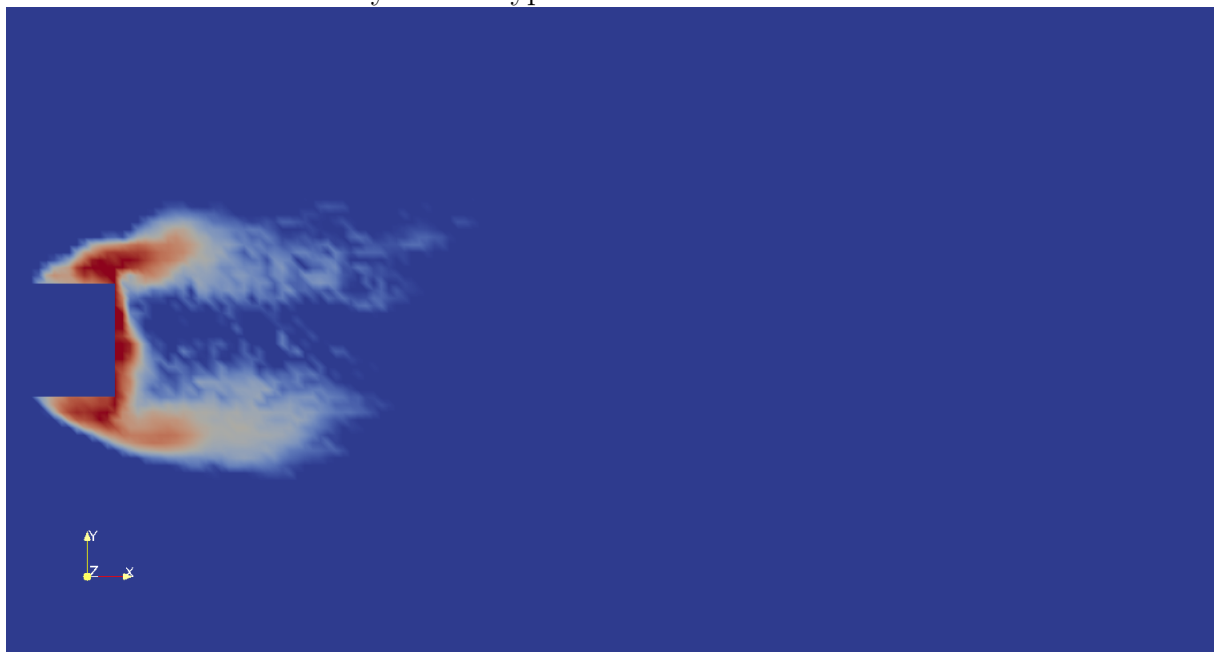
Modelový čas od vypuštění částic: 35 minut



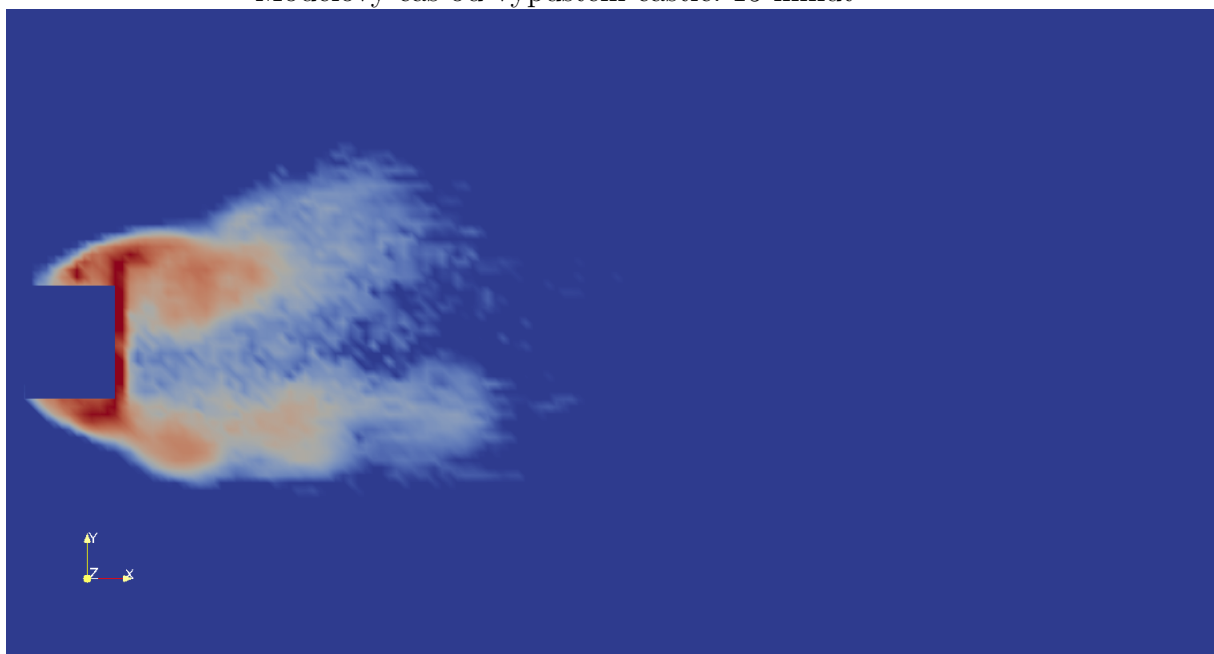
Obrázek 9.4: A1-5: Pohyb částic v prostoru.

9.1.2 Vývoj přízemní koncentrace

Modelový čas od vypuštění částic: 10 minut

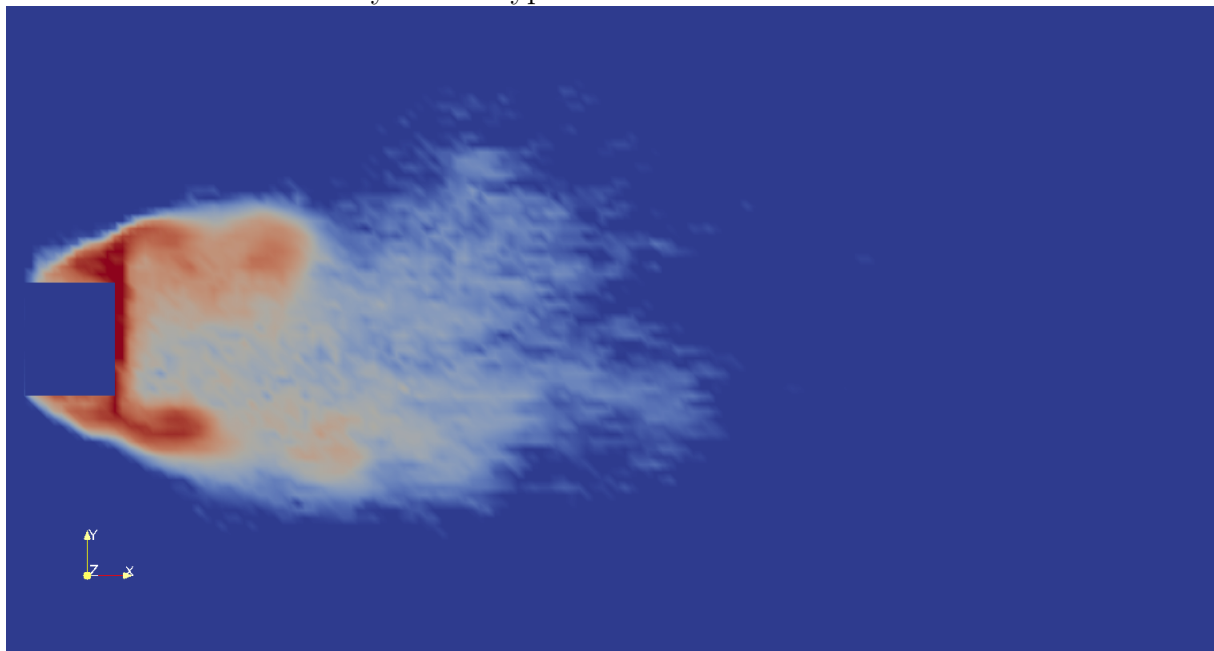


Modelový čas od vypuštění částic: 15 minut

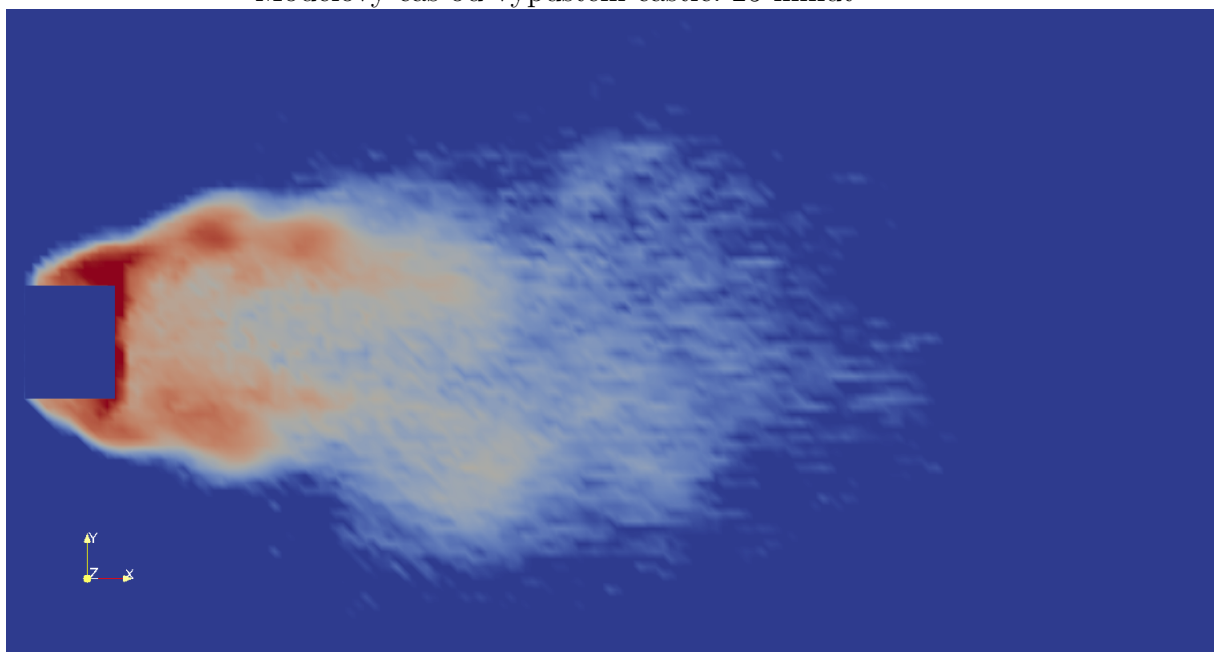


Obrázek 9.5: A1-5: Vývoj přízemní koncentrace.

Modelový čas od vypuštění částic: 20 minut

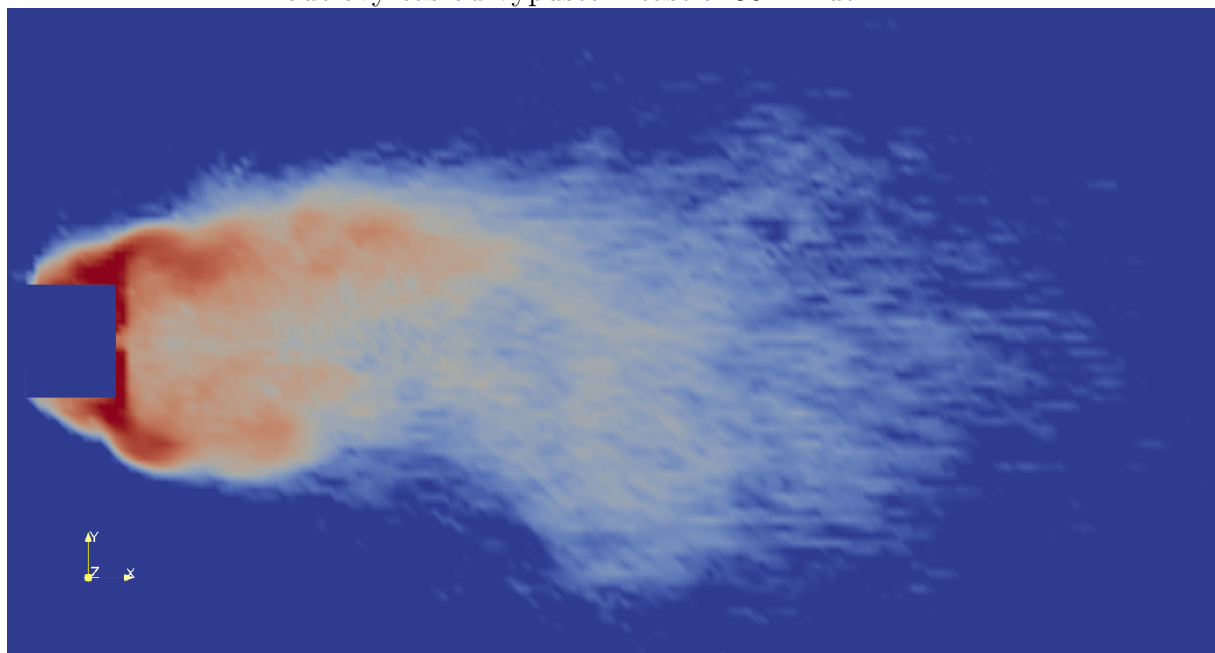


Modelový čas od vypuštění částic: 25 minut

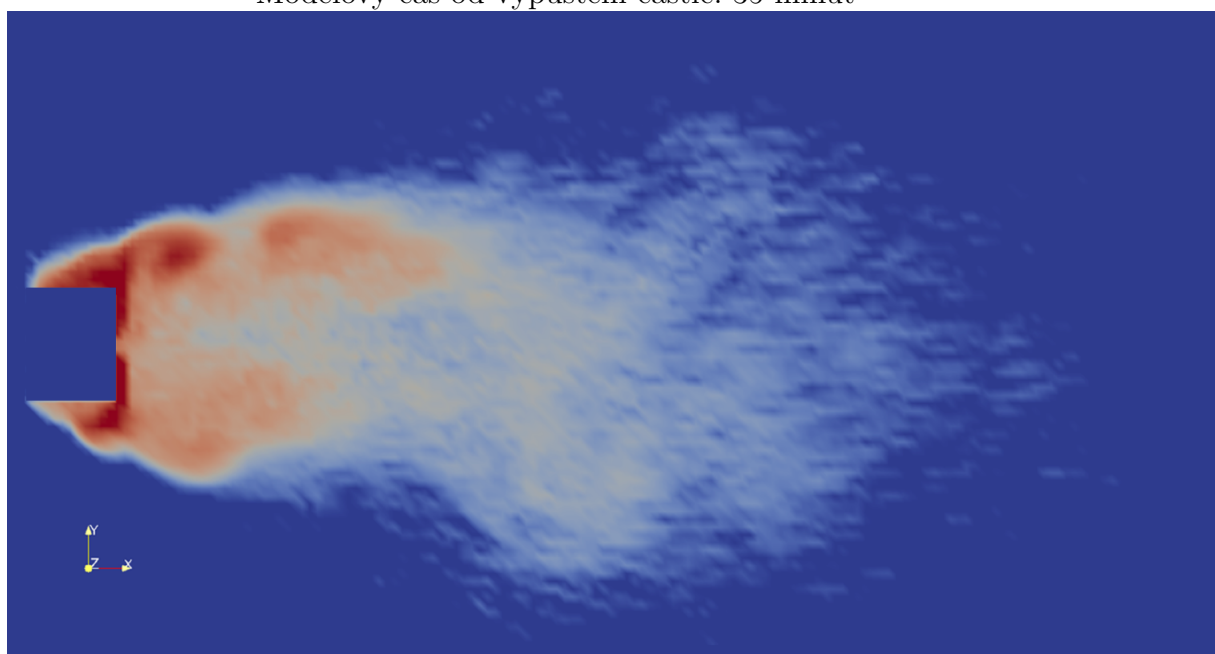


Obrázek 9.6: A1-5: Vývoj přízemní koncentrace.

Modelový čas od vypuštění částic: 30 minut

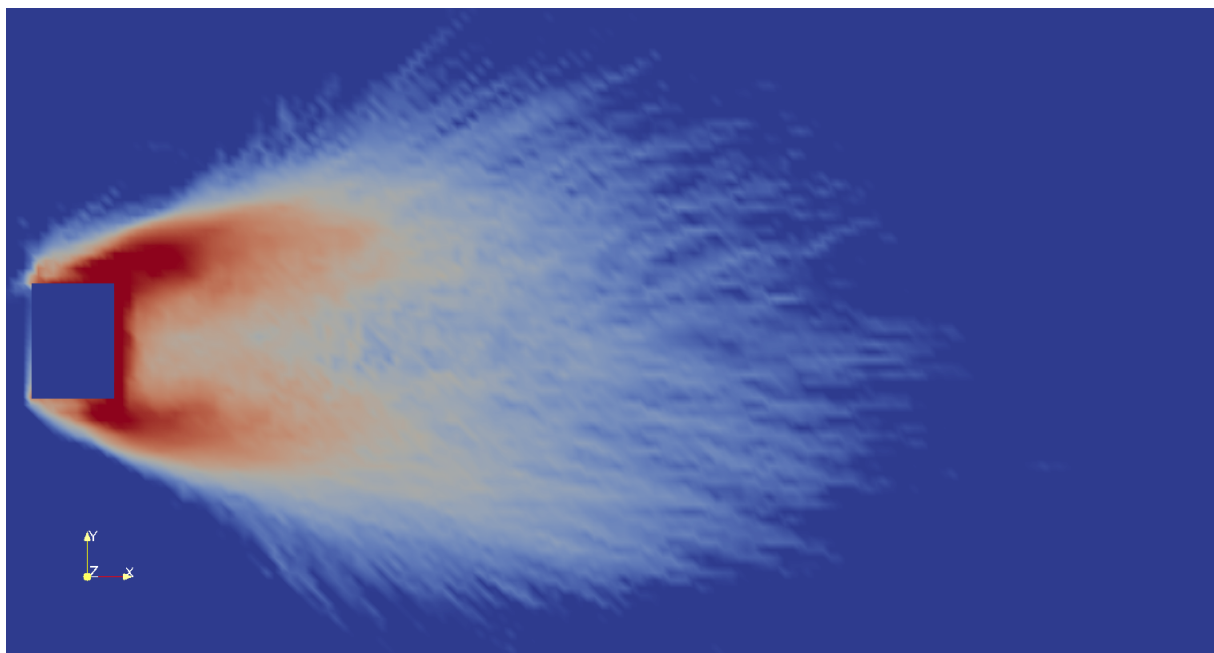


Modelový čas od vypuštění částic: 35 minut



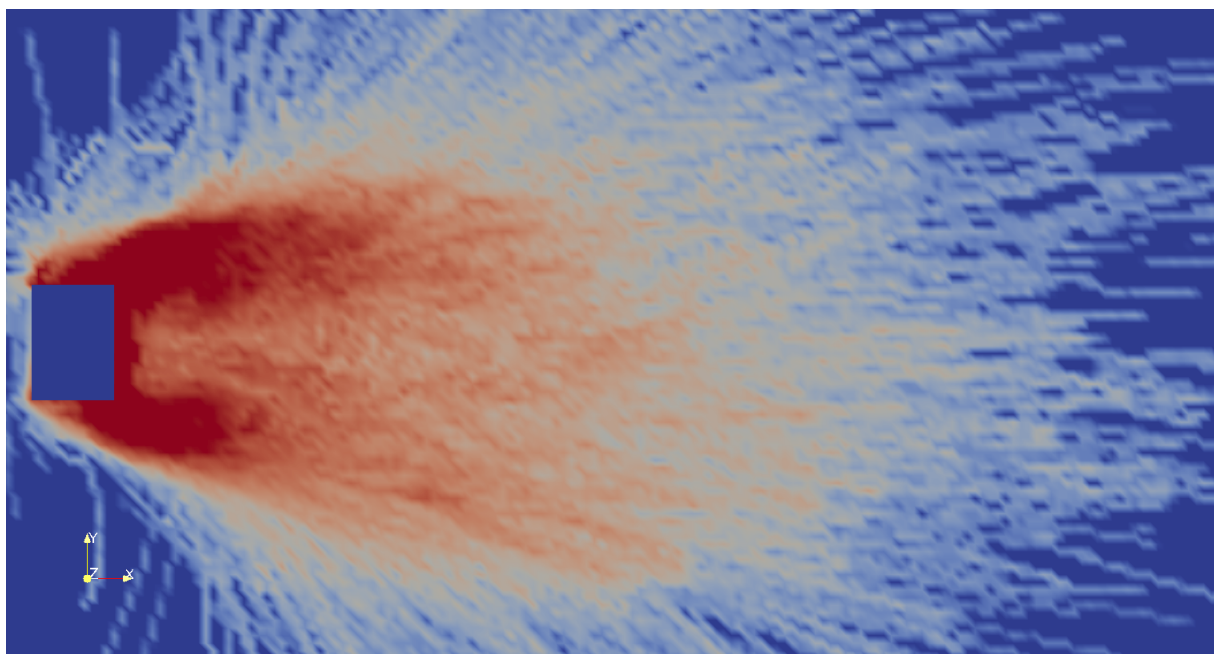
Obrázek 9.7: A1-5: Vývoj přízemní koncentrace.

9.1.3 Průměrná přízemní koncentrace



Obrázek 9.8: A1-5: Průměrná přízemní koncentrace.

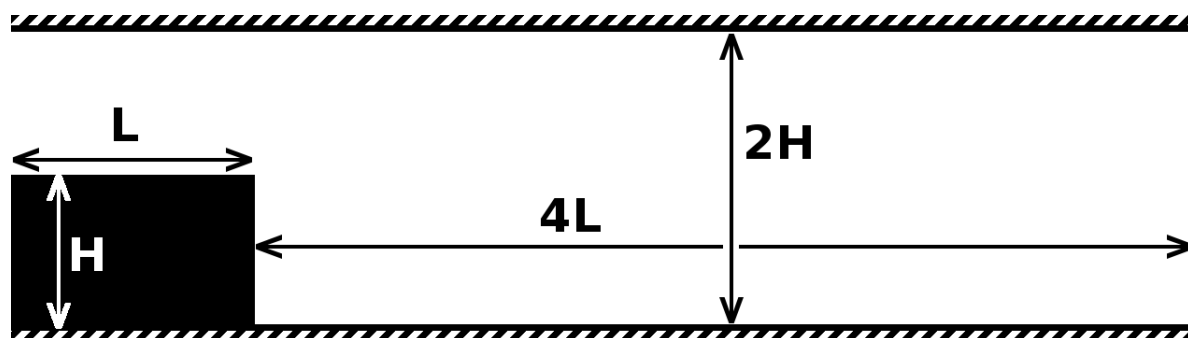
9.1.4 Maximální dosažená přízemní koncentrace



Obrázek 9.9: A1-5: Maximální dosažená přízemní koncentrace.

9.2 Zpětný schod

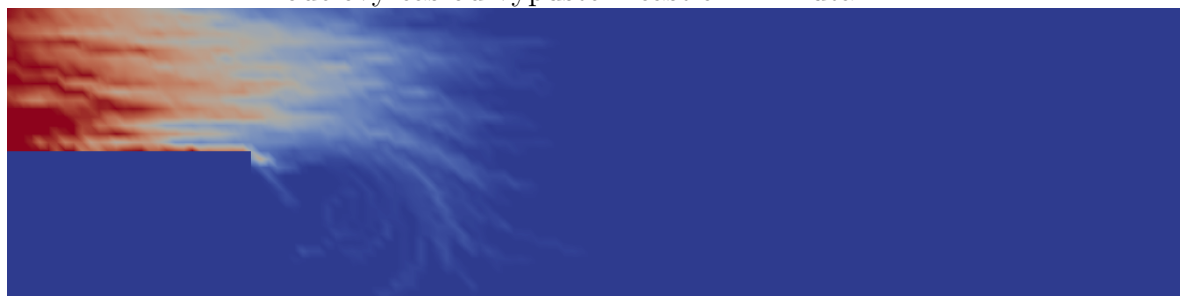
Geometrické uspořádání příkladu je zobrazeno na obrázku 9.10.



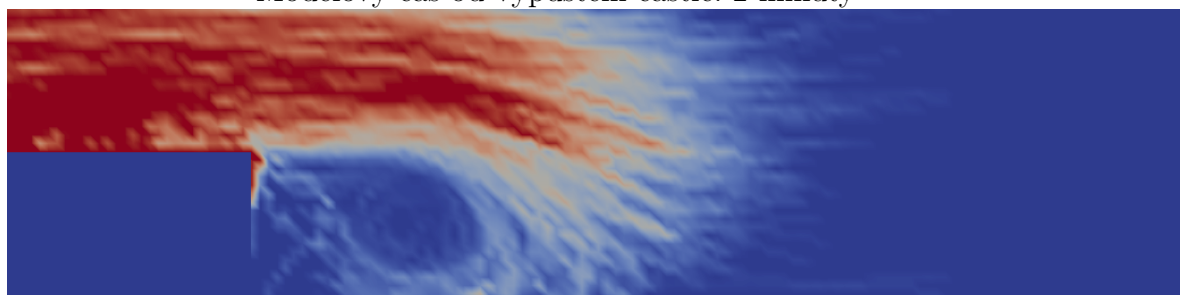
Obrázek 9.10: Zpětný schod - geometrické uspořádání.

9.2.1 Vývoj vertikálního profilu koncentrace

Modelový čas od vypuštění částic: 1 minuta

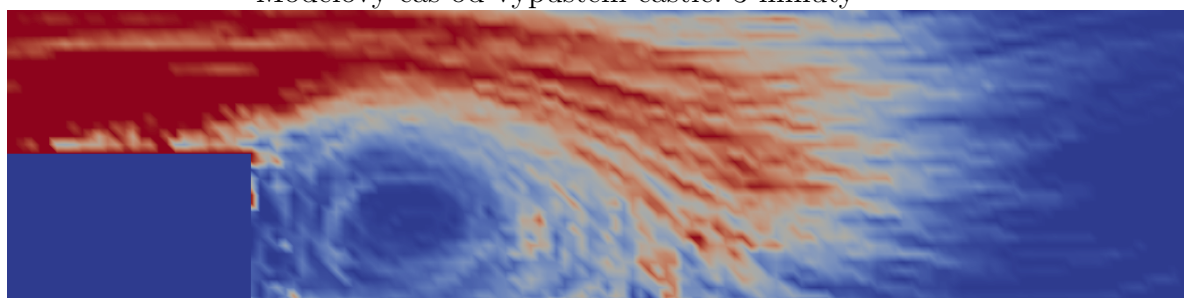


Modelový čas od vypuštění částic: 2 minuty

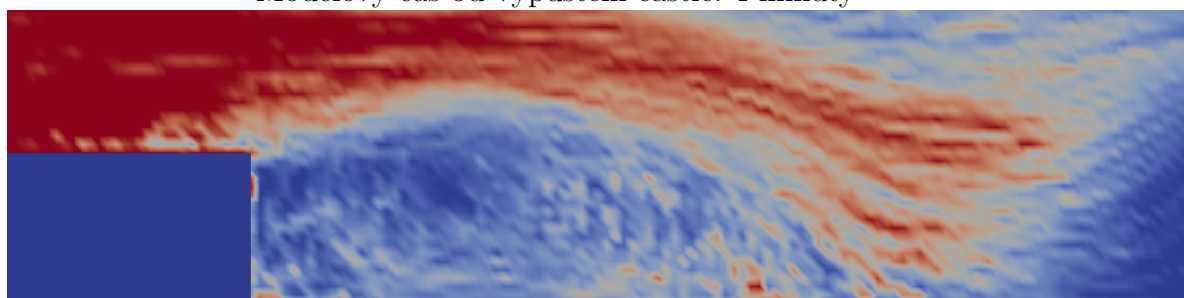


Obrázek 9.11: Zpětný schod: Vývoj vertikálního profilu koncentrace.

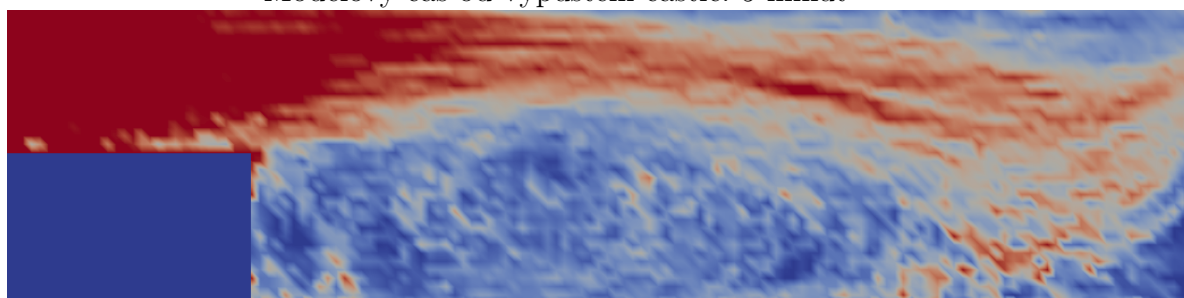
Modelový čas od vypuštění částic: 3 minuty



Modelový čas od vypuštění částic: 4 minuty

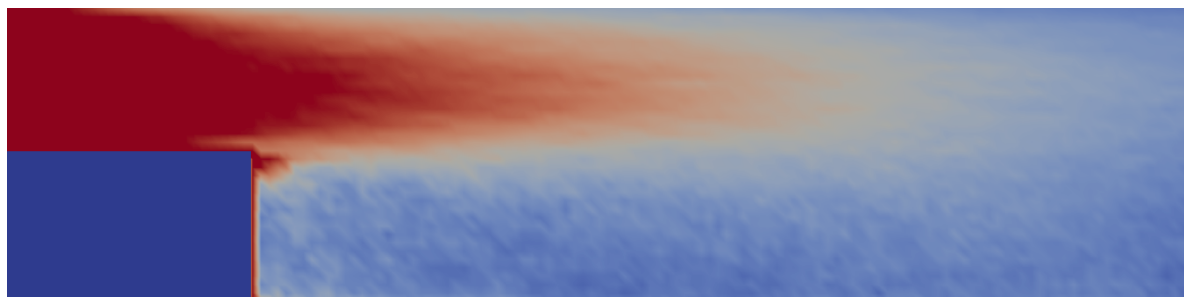


Modelový čas od vypuštění částic: 5 minut



Obrázek 9.12: Zpětný schod: Vývoj vertikálního profilu koncentrace.

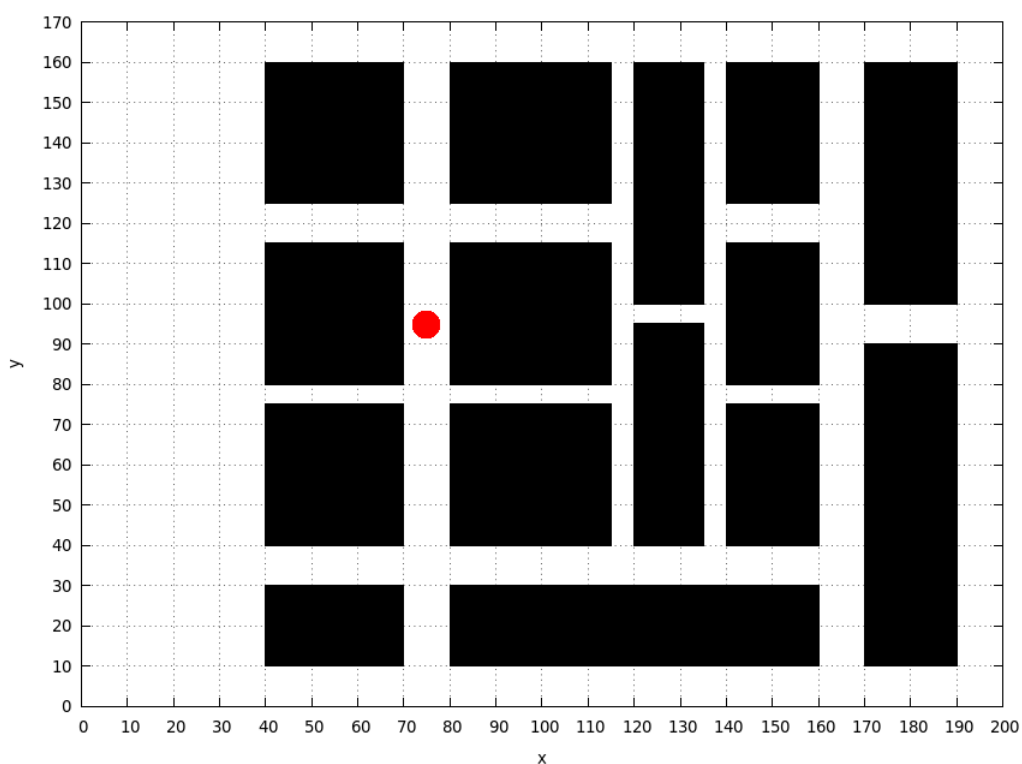
9.2.2 Průměrná koncentrace



Obrázek 9.13: Zpětný schod: Průměrná koncentrace.

9.3 Seskupení budov

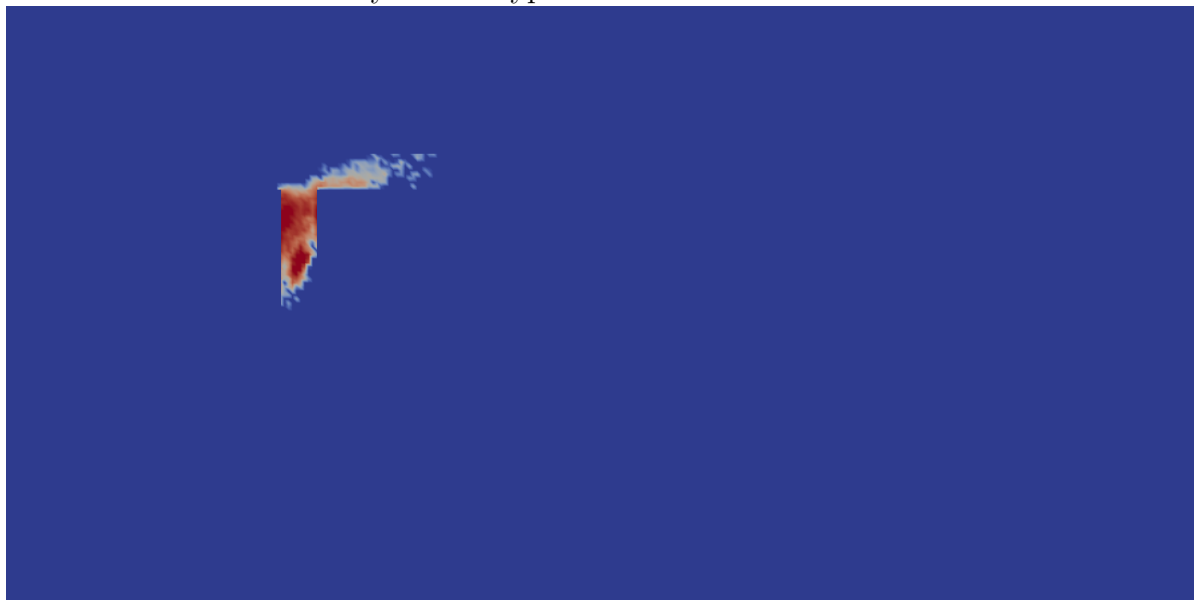
Geometrické uspořádání příkladu je zobrazeno na obrázku 9.14. Zdroj znečištění byl umístěn na pozici $Z = [75; 95]$ a na obrázku je označen červenou tečkou.



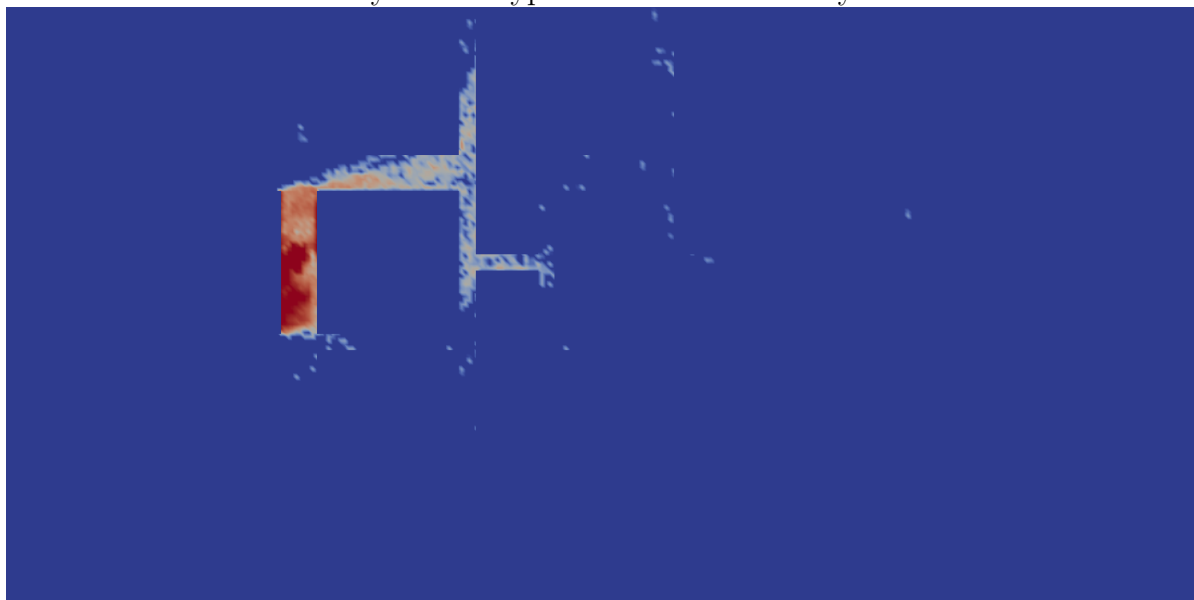
Obrázek 9.14: Seskupení budov - geometrické uspořádání.

9.3.1 Vývoj přízemní koncentrace

Modelový čas od vypuštění částic: 1 minuta

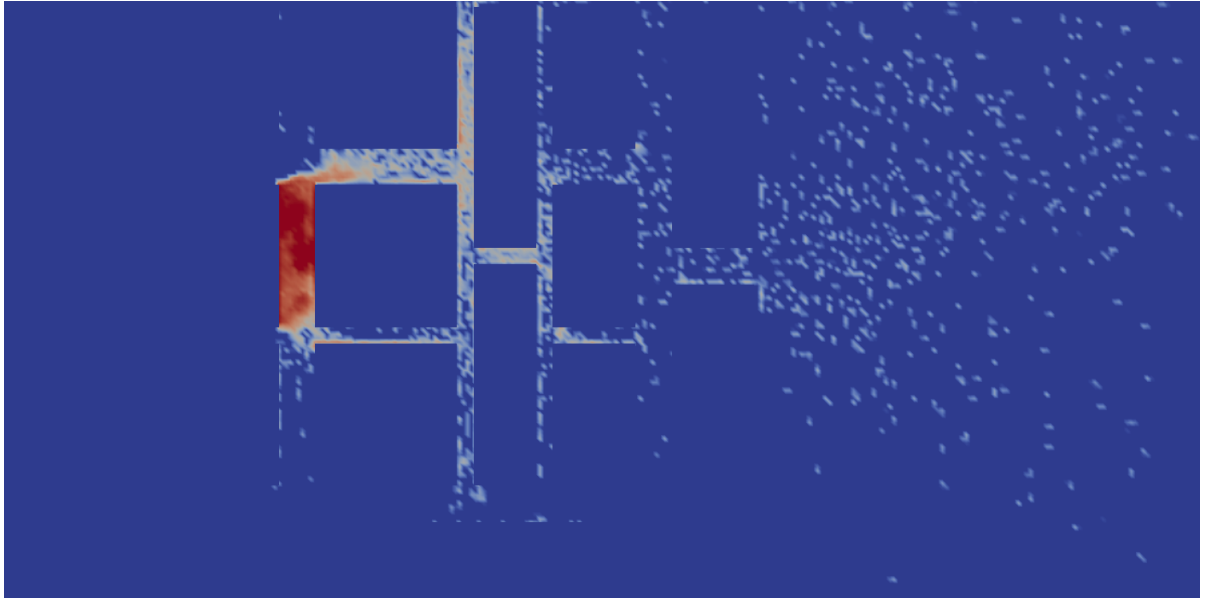


Modelový čas od vypuštění částic: 2 minuty

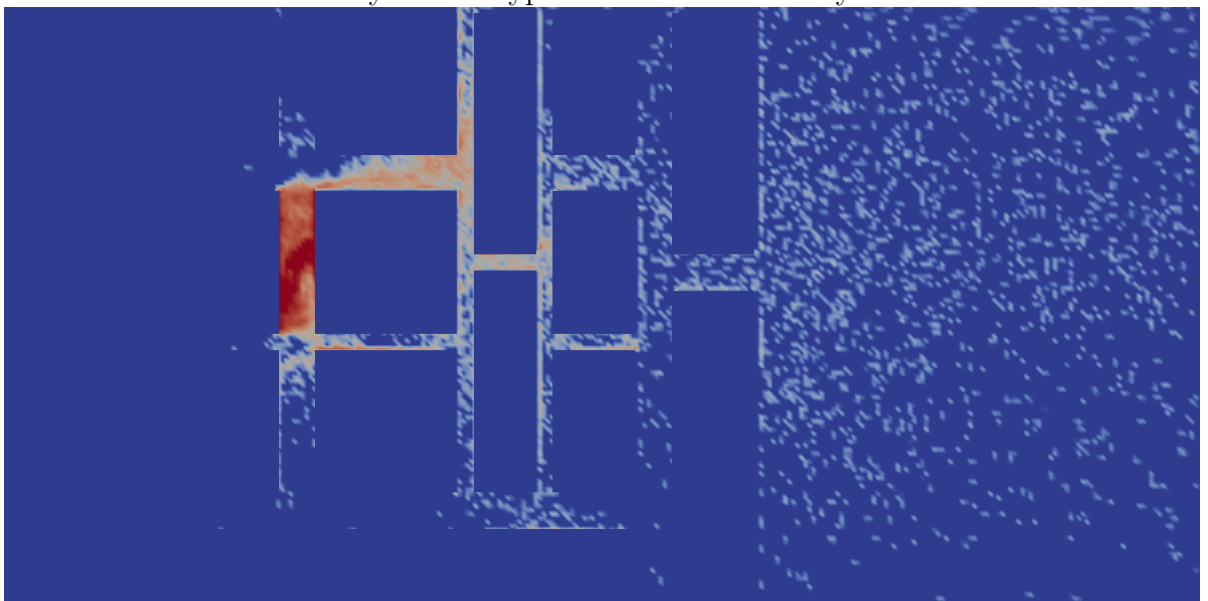


Obrázek 9.15: Seskupení budov: Vývoj přízemní koncentrace.

Modelový čas od vypuštění částic: 3 minuty

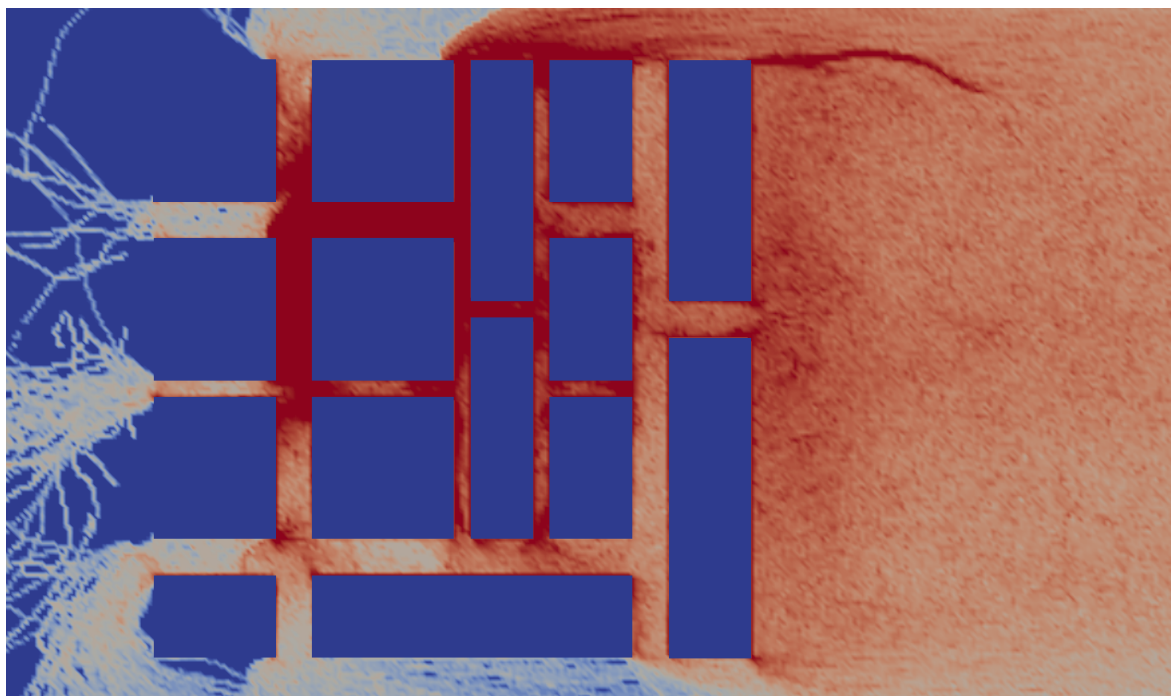


Modelový čas od vypuštění částic: 4 minuty



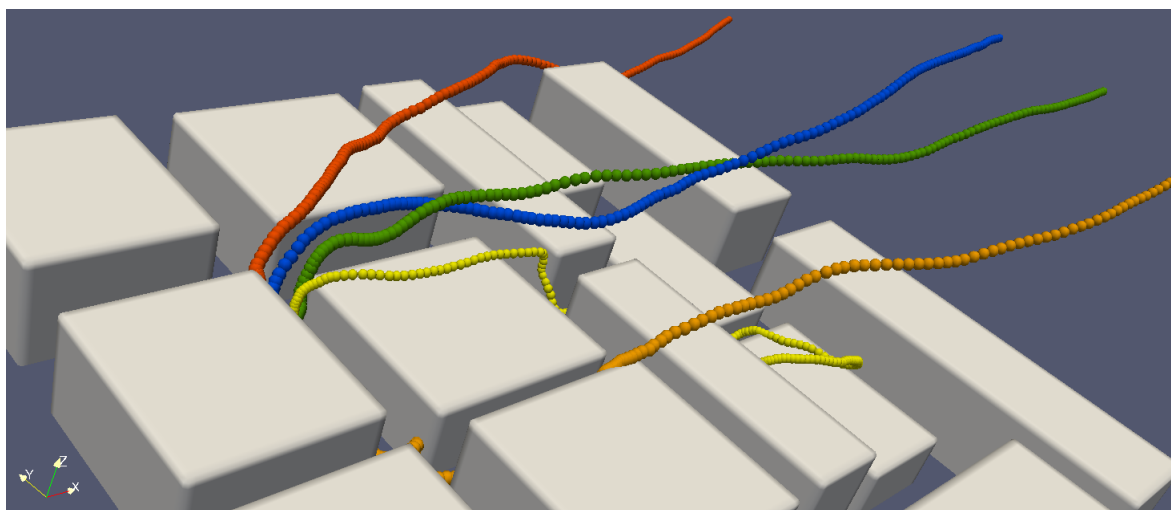
Obrázek 9.16: Seskupení budov: Vývoj přízemní koncentrace.

9.3.2 Maximální dosažená přízemní koncentrace



Obrázek 9.17: Seskupení budov: Maximální dosažená přízemní koncentrace.

9.3.3 Trajektorie částic



Obrázek 9.18: Seskupení budov: Trajektorie vybraných částic.

10. Závěr

10.1 Dosažené výsledky

Hlavním cílem této práce bylo vyvinout a otestovat Lagrangeovský dispersní model (LDM), který by spolupracoval s modelem proudění CLMM vyvinutým na Katedře fyziky atmosféry Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy.

V této práci je napřed nastíněna problematika numerických simulací atmosféry (kapitola 3). Poté je blíže představen model CLMM (kapitola 5) spadající do kategorie modelů LES (kapitola 4). Následně jsou blíže diskutovány různé přístupy k numerickému modelování šíření znečištění v ovzduší (kapitola 6).

V této práci vyvinutý model LDM je představen v kapitole 7. Jsou diskutovány výhody a nevýhody použití spojového seznamu k reprezentaci částic znečištění v počítači a potíže spojené s paralelizací výpočtů v modelu. Do modelu LDM byly implementovány reprezentace různých zdrojů znečištění. Je možné využít bodové, kulové, liniové, plošné nebo objemové zdroje ve tvaru kváдру. Je možné simulovat i časově nestacionární zdroje.

Velká výhoda modelu LDM je jeho modulárnost. Díky ní je velice jednoduché přidávat do modelu další funkce, případně upravovat stávající. Další charakteristickou vlastností modelu LDM je jeho konfigurovatelnost. Uživatel může volit různé parametry tak, aby nejlépe vyhovovali konkrétní úloze.

Interpolační schéma je možné vybírat z metody nejbližšího souseda a trilineární metody. Implementovaná integrační schémata jsou: Eulerova metoda, Hunova metoda, Adamsova-Bashforthova metoda a metoda Runge-Kutta.

Důležitou součástí modelu je subgridní schéma, které je představeno v kapitole 7.1.5.2.

Model LDM má také široké možnosti datových výstupů. Jejich praktická ukázka je v kapitole 9.

V kapitole 7.3 byly provedeny základní testy výkonu modelu. Naměřené zrychlení při použití paralelního běhu na 4 procesorech oproti běhu na jediném procesoru je $S = (3, 2 \pm 0, 1)$. Když vezmeme v úvahu složitosti paralelizace vyplývající z vlastností spojového seznamu, jedná se o docela dobrou hodnotu, která není daleko od

teoretického maxima. Rozdíly v délce výpočtu při použití různých integračních a interpolačních schémat jsou do 10 %.

V kapitole 8 byla provedena validace modelu. Napřed byla ověřena stabilita. LDM se ukázal jako stabilní model i pro velký počet částic (několik jednotek až desítek milionů) i při výpočetních časech dosahujících několika desítek hodin. Následně byla ověřena takzvaná well mixed podmínka. Bylo zjištěno, že odchylka od ideálního rozložení částic se pohybuje pod 5 %. Při vytvoření časového průměru rozložení částic byla odchylka pod 1 %. Takováto přesnost je v současnosti naprosto dostačující. Nakonec byly výsledky modelu LDM porovnány s výsledky experimentu ve větrném tunelu. Za testovací příklad byl zvolen případ CEDVAL A1-5. Experiment CEDVAL proběhl ve větrném tunelu na Meteorologickém institutu Univerzity v Hamburku. Výsledky srovnání jsou uvedeny v kapitole 8.3. Z výsledků je patrná dobrá shoda experimentu s modelem LDM.

Hlavní motivací pro kapitolu 9 bylo ukázat možnosti různých datových výstupů z modelu a také otestovat stabilitu a chování modelu v různých situacích a při různém nastavení. Kromě výstupů z příkladu CEDVAL A1-5 jsou zde uvedeny také výsledky z příkladu se zpětným schodem a z příkladu se seskupením budov. Mezi výstupy jsou uvedeny trajektorie vybraných částic, vývoj pole koncentrace, maximální a průměrné rozložení koncentrace a pohyb částic v prostoru.

10.2 Další možný postup při vývoji

Model LDM se ukazuje jako vcelku schopný nástroj. Případný další vývoj by měl být určen požadavky vyplývajícími z praktického využití modelu. Nabízí se několik oblastí dalšího možného vývoje.

Paralelizace. V LDM je implementována velice efektivní paralelizace pro počítače se sdílenou pamětí. Stejný princip paralelizace je možné využít i pro počítače s distribuovanou pamětí. Model LDM by pak bylo možné použít i na clusterech.

Generátor zdrojů. Časová nestacionárnost zdrojů je řešena použitím řady zdrojů s různou intenzitou. Bylo by možné vytvořit generátor takovéto řady zdrojů, případně implementovat nestacionární zdroje jiným způsobem.

Chemie, radioaktivita a další. Díky modulárnosti, není problém přidat do modelu různé další fyzikální či chemické procesy.

Pevné překážky. V současné době model LDM velice dobře pracuje s pravoúhlými překážkami. Při použití komplexnější geometrie by bylo vhodné schéma zpracování překážek vylepšit.

Ukládání. Zapisování datových výstupů z modelu je při použití velkého počtu částic vcelku zdlouhavé. Řešením by mohlo být paralelní zpracování jejich ukládání.

Literatura

- [1] Cleveland Abbe. The physical basis of long-range weather forecasts 1. *Monthly Weather Review*, vol. 29(issue 12):551–561, 1901. 3.1
- [2] Domenico Anfossi, Gianni Tinarelli, Silvia Trini Castelli, Enrico Ferrero, Dietmar Oetl, Gervasio Annes Degrazia, and Luca Mortarini. Well mixed condition verification in windy and low wind speed conditions. *International Journal of Environment and Pollution*, vol. 40(1/2/3):49–61, 2010. 7.1.5.2
- [3] Jan Bednář and Otakar Zikmunda. *Fyzika mezní vrstvy atmosféry*. Academia, Praha, vyd. 1. edition, 1985. 2, 3.2, 6.1, 7.1.3
- [4] C. H. Bosanquet and J. L. Pearson. The spread of smoke and gases from chimneys. *Transactions of the Faraday Society*, vol. 32:1249–1263, 1936. 6
- [5] Jörg Franke, Antti Hellsten, Heinke Schlünzen, and Bertrand Carissimo. *Best practice guideline for the CFD simulation of flows in the urban environment*. COST Action 732: Quality assurance and improvement of microscale meteorological models, Hamburg, 2007. 8.3
- [6] Vladimír Fuka. Mathematical modelling of air flow in geometrically complicated areas, 2014. 1, 3.2, 3.2.3, 4.2, 5
- [7] Vladimír Fuka and Josef Brechler. Large eddy simulation of the stable boundary layer. In *Finite Volumes for Complex Applications VI Problems & Perspectives*, page 485, London, 2011. Springer. 1
- [8] Si-Wan Kim, Chin-Hoh Moeng, Jeffrey C. Weil, and Mary C. Barth. Lagrangian particle dispersion modeling of the fumigation process using large-eddy simulation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 62(issue 6):1932–1946, 2005. 7.1.4
- [9] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 434(issue 1890):9–13, 1991-07-08. 4

- [10] Bernd Leitl. Cedval at hamburg university, 2015. 8.3
- [11] Randall J LeVeque. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 2007. 5, 7.1.5.3
- [12] Peter Lynch. The origins of computer weather prediction and climate modeling. *Journal of Computational Physics*, vol. 227(issue 7):3431–3444, 2008. 3.1
- [13] Jost Nielinger, Rainer Röckle, Hans-Christian Höfl, and Werner-Jürgen Kost. Lagrange versus eulerian dispersion modeling comparison for investigations concerning air pollution caused by traffic. In *9th Int. Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, pages 192–132, 2004. 6.2
- [14] Lewis Fry Richardson. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, Cambridge, 2nd ed. edition, 2007. 3.1
- [15] Pierre Sagaut and with a foreword by Charles Meneveau. *Large eddy simulation for incompressible flows an introduction*. Springer-Verlag, Berlin, 3rd ed. edition, 2006. 4.2
- [16] Joseph Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly weather review*, Volume 91(Issue 3):99–164, 1963. 4.2, 4.2
- [17] A. Stohl, C. Forster, A. Frank, P. Seibert, and G. Wotawa. Technical note. *Atmospheric Chemistry and Physics*, vol. 5(issue 9):2461–2474, 2005. 6.2, 6.3
- [18] O. G. Sutton. The problem of diffusion in the lower atmosphere. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, vol. 73(317-318):257–281, 1947. 6
- [19] H Tennekes and John L Lumley. *A first course in turbulence*. MIT Press, Cambridge, Mass., [1972]. 4.1
- [20] D. J. Thomson. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 180(issue -1):529–, 1987. 7.1.4, 7.1.5.2, 7.1.5.2, 8.2

- [21] Marek Uliasz. Lagrangian particle dispersion modeling in mesoscale applications. In *Environmental Modeling*, pages 71–101, Southampton, 1994. Computational Mechanics Publications. 7.1.6, 7.1.6
- [22] Jeffrey C. Weil, Peter P. Sullivan, and Chin-Hoh Moeng. The use of large-eddy simulations in lagrangian particle dispersion models. *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 61(issue 23):2877–2887, 2004. 7.1.4, 7.1.4, 7.1.5.2, 7.1.5.2, 8.2
- [23] John D. Wilson and Brian L. Sawford. Review of lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 78(1-2):191–210, 1996. 6.2