

**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Lukáš Bartík

**Štúdium troposférickej chémie pomocou
regionálneho klimatického modelu
RegCM4 a chemického transportného
modelu CAMx**

Katedra fyziky atmosféry

Vedúci diplomovej práce: Mgr. Peter Huszár, Ph.D.

Študijný program: Fyzika

Študijný odbor: Meteorologie a klimatologie

Praha 2020

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval(a) 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 má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V Trenčíně dňa 20.7.2020

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Farkas', written in a cursive style.

Na tomto mieste by som chcel veľmi poďakovať Mgr. Petrovi Huszárovi, Ph.D. za celkový prístup pri vedení práce, za množstvo času, ktoré mi venoval pri oboznamovaní sa s problematikou modelovania klímy a chemizu atmosféry, za rady pri realizácii modelových behov, ako aj za poskytnutie niektorých vstupných dát nutných k ich realizácii.

Názov práce: Štúdium troposférickej chémie pomocou regionálneho klimatického modelu RegCM4 a chemického transportného modelu CAMx

Autor: Lukáš Bartík

Katedra: Katedra fyziky atmosféry

Vedúci diplomovej práce: Mgr. Peter Huszár, Ph.D., Katedra fyziky atmosféry

Abstrakt: Predmetom diplomovej práce je štúdium dopadov rôznych implementácií turbulencie a konvekcie v regionálnom klimatickom modeli RegCM (Regional Climate Model, verzia 4.6) na schopnosť prediktability chemického znečistenia troposféry v oblasti Európy, ktoré bolo simulované riadením chemického transportného modelu CAMx (Comprehensive Air quality Model with extensions, verzia 6.50) meteorologickými poliami z modelu RegCM pomocou offline prepojenia týchto dvoch modelov. Súčasťou práce je stručný popis chemizmu troposféry, diskusia vplyvu počasia na zmeny koncentrácií polutantov v troposfére, popis oboch modelov a spôsob ich prepojenia. Ťažiskom práce sú analýzy dopadov zmien parametrizácií v simuláciách modelom RegCM na niektoré klimatické prvky, validácia teploty vzduchu a zrážok, analýza dopadov zmien riadiacej meteorológie na koncentrácie ozónu, oxidu dusičitého, oxidu siričitého a jemnej frakcie aerosólov, validácia modelových koncentrácií týchto polutantov s meraniami na vidieckych monitorovacích staniciach a porovnanie stĺpcových koncentrácií oxidu dusičitého s družicovými meraniami.

Kľúčové slová: klíma, atmosférická chémia, klimatický model, chemický transportný model, validácia

Title: Study of tropospheric chemistry using regional climate model RegCM4 and chemistry transport model CAMx

Author: Lukáš Bartík

Department: Department of Atmospheric Physics

Supervisor: Mgr. Peter Huszár, Ph.D., Department of Atmospheric Physics

Abstract: The subject of this diploma thesis is study of the impacts of different implementations of turbulence and convection in the Regional Climate Model (RegCM, version 4.6) on the ability to predict the chemical pollution of the troposphere in Europe, which was simulated by the chemical transport model CAMx (Comprehensive Air quality Model with extensions, version 6.50) driven by RegCM meteorology using offline coupling of these two models. Thesis also includes a brief description of the tropospheric chemistry, a discussion of the influence of meteorological conditions on changes in pollutant concentrations in the troposphere, a brief introduction to the regional climate modeling, a description of both models and method of their coupling. The main focus of the thesis is the analysis of the impacts of different parameterizations in RegCM model simulations on some climatic elements, validation of air temperature and precipitation, analysis of the impacts of changes in driving meteorology on ozone, nitrogen dioxide, sulfur dioxide and fine aerosol, validation of model concentrations of these pollutants with measurements at rural monitoring stations and comparison of column concentrations of nitrogen dioxide with satellite measurements.

Keywords: climate, atmospheric chemistry, climate model, chemistry transport model, validation

Obsah

Zoznam použitých skratiek	3
Úvod	5
1 Troposféra – štruktúra a chemizmus	14
1.1 Štruktúra troposféry	15
1.2 Chemizmus v plynnej fáze	17
1.2.1 Chemizmus NO ₂	20
1.2.2 Chemizmus O ₃ a ROL	22
1.2.3 Chemizmus SO ₂	29
1.3 Chemizmus aerosólov	30
1.3.1 Chemizmus anorganických aerosólov	33
1.3.2 Chemizmus organických aerosólov	34
2 Diskusia o počasí v troposfére a jeho vplyve na zmeny koncentrací polutantov	36
2.1 Situácia v oblastiach tlakových výší	38
2.2 Situácia v oblastiach tlakových níží	41
3 Regionálne klimatické modelovanie a popis RegCM 4.6	44
3.1 Úvod do regionálneho klimatického modelovania	46
3.2 Komponenty RegCM 4.6	52
3.2.1 Hydrostatické dynamické jadro a diskretizácia siete modelu	52
3.2.2 Parametrizácie zabudované v RegCM 4.6	57
3.3 Parametrizácie MVA použité v simuláciách klímy	61
3.4 Parametrizácie konvekcie použité v simuláciách klímy	64
4 Popis CAMx 6.50 a jeho <i>offline</i> prepojenia s RegCM 4.6	67
4.1 Popis CAMx 6.50	67
4.1.1 Jadro modelu a diskretizácia siete	67
4.1.2 Chemické mechanizmy	74
4.2 <i>Offline</i> prepojenie CAMx 6.50 s RegCM 4.6 pomocou RegCM2CAMx	79
4.2.1 Poznámka o všeobecných spôsoboch prepojenia modelov .	79
4.2.2 Popis a funkcia RegCM2CAMx	79
5 Simulácie klímy modelom RegCM 4.6	82
5.1 Zhotovenie testovacích simulácií	82
5.2 Validácia testovacích simulácií	84
5.2.1 Metodika konštrukcie polí klimatických prvkov a výpočtu štatistických ukazovateľov	85
5.2.2 Výsledky validácie	87
5.3 Analýza testovacích simulácií	101
5.3.1 Metodika konštrukcie polí a vertikálnych profilov rozdielu klimatických prvkov	101
5.3.2 Výsledky analýzy klimatických prvkov	102

6 Chemicko-transportné simulácie modelom CAMx 6.50	117
6.1 Zhotovenie simulácií	117
6.2 Analýza simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)	118
6.2.1 Metodika konštrukcie polí a vertikálnych profilov	118
6.2.2 Výsledky analýzy	119
6.3 Validácia simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)	152
6.3.1 Metodika validácie	152
6.3.2 Výsledky validácie	156
6.4 Diskusia výsledkov	162
Záver	176
Tabulková príloha	179
Zoznam použitej literatúry	192
Zoznam obrázkov	199
Zoznam tabuliek	203

Zoznam použitých skratiek

a i.	a iné
AGCM	atmosférický globálny cirkulačný model (z anglického termínu <i>Atmospheric Circulation Models</i>)
AOGCMs	atmosféricko-oceánske globálne cirkulačné modely (z anglického termínu <i>Atmosphere–Ocean General Circulation Models</i>)
Bash	<i>Bourne again shell</i>
BATS1e	<i>Biosphere-Atmosphere Transfer Scheme version 1e</i>
BROL	biogénne reaktívne organické látky
CAMx	<i>Comprehensive Air quality Model with Extensions</i>
CAMx6.50	CAMx verzia 6.50
CBM-Z	<i>Carbon Bond Mechanism Z</i>
CB05	<i>Carbon Bond Mechanism 2005</i>
CDO	<i>Climate Data Operators</i>
CF modul	<i>Coarse/Fine Module</i>
CGCM2	<i>Canadian General Circulation Model version 2</i>
CGs	plyny schopné kondenzácie (z anglického termínu <i>condensable gasses</i>)
CMAQ	<i>The Community Multiscale Air Quality Modeling System</i>
CMIP5	<i>Coupled Model Intercomparison Project Phase 5</i>
CRCM	<i>Canadian Regional Climate Model</i>
DD	dynamický downscaling
DJF	zimná sezóna (zahŕňa mesiace: január, február a december)
EBI metóda	<i>Euler Backward Iteration method</i>
ECMWF	<i>European Centre for Medium-Range Weather Forecasts</i>
ERP	efektívne radiačne pôsobenie
ESMs	modely zemského systému (z anglického termínu <i>Earth System Models</i>)
FUME	<i>Flexible Universal Processor for Modeling Emissions</i>
GCM(s)	dynamický(é) (cirkulačný(é)) model(y) (z anglického termínu <i>General Circulation Model(s)</i>)
CHTM	chemický(é) transportný(é) model(y)
ICTP	<i>Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics</i>
JJA	letná sezóna (zahŕňa mesiace: jún, júl a august)
LAM(s)	model(y) predpovedi počasia na obmedzenej oblasti (z anglického termínu <i>Limited Area Model(s)</i>)
MACC-III	<i>Monitoring Atmospheric Composition and Climate – Phase III</i>
MAM	jarná sezóna (zahŕňa mesiace: marec, apríl a máj)
MDRH	<i>Mutual Deliquescence Relative Humidity</i>
MEGAN	<i>Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature</i>
MLS	<i>Microwave Limb Sounder</i>
MM5	<i>Penn State/NCAR Mesoscale Model version 5</i>
MOZART-4	<i>Model for OZone and Related chemical Tracers version 4</i>
MPI	rozhranie na výmenu správ (z anglického termínu <i>Message Passing Interface</i>)
MVA	medzná vrstva atmosféry
napr.	napríklad
NCAR	<i>National Center for Atmospheric Research</i>
NCAR CCM3	<i>NCAR Community Climate Model version 3</i>
NCEP	<i>National Centers for Environmental Prediction</i>
NetCDF-4	<i>Network Common Data Form version 4</i>
NMVOCs	nemetánové organické prchavé látky (z anglického termínu <i>Non-methane volatile organic compounds</i>)
NWP model	Numerický model predpovedi počasia (z anglického termínu <i>Numerical Weather Prediction Model</i>)

obr.	obrázok
OMI	<i>Ozone Monitoring Instrument</i>
PAN	peroxyacetylnitrát
PM _{d_p}	aerosólové častice s aerodynamickým priemerom $\leq d_p$
PM _{2,5}	aerosólové častice s aerodynamickým priemerom $\leq 2,5 \mu\text{m}$
PM ₁₀	aerosólové častice s aerodynamickým priemerom $\leq 10 \mu\text{m}$
POA	primárny(e) organický(é) aerosól(y)
RCM(s)	regionálny(e) klimatický(é) model(y) (z anglického termínu <i>Regional Climate Model(s)</i>)
resp.	respektíve
RegCM	<i>Regional Climate Model</i>
RegCM 4.6	RegCM verzia 4.6
RMSE	odmocnina strednej kvadratickej chyby (z anglického termínu <i>Root Mean Square Error</i>)
ROL	reaktívne organické látky
RP	radiačne pôsobenie
RRTMG-LW	<i>A Rapid Radiative Transfer Model for the longwave region for application to General circulation models</i>
RRTMG-SW	<i>A Rapid Radiative Transfer Model for the solar spectral region for application to General circulation models</i>
SOA	sekundárny(e) organický(é) aerosól(y)
SON	jesenná sezóna (zahŕňa mesiace: september, október a november)
SST	teplota povrchu mora (z anglického termínu <i>Sea Surface Temperature</i>)
SUBEX	<i>Subgrid Explicit Moisture Scheme</i>
SVOC	ROL s menšou prchavosťou (z anglického termínu <i>Semi-volatile organic compounds</i>)
tab.	tabuľka
t. j.	to jest
TNO	<i>The Netherlands Organisation for Applied Scientific Research</i>
UT	univerzálny (svetový) čas (z anglického termínu <i>Universal Time</i>)
UW	Washingtonská univerzita (z anglického termínu <i>The University of Washington</i>)
VRGCMs	dynamické (cirkulačné) modely s premenlivým rozlíšením (z anglického termínu <i>Variable Resolution General Circulation Models</i>)
VT	voľná troposféra
WBF proces	Wegenerov–Bergeronov–Findeisenov proces
WRF	<i>Weather Research and Forecasting Model</i>
z. d.	zemepisná dĺžka, zemepisné dĺžky
z. š.	zemepisná šírka, zemepisné šírky

Úvod

Predmetom mojej diplomovej práce je štúdium chémie troposféry* pomocou prepojenia regionálneho klimatického modelu s modelom chemickým transportným, preto na vytvorenie aspoň základnej predstavy pre prípadných, nezainteresovaných čitateľov:

- nielen o tejto problematike, ale všeobecne o dôvodoch, prečo je vlastne nutné pri štúdiu rôznych aspektov pôsobiacich v klimatickom systéme pristupovať k jeho numerickému modelovaniu,
- ako aj o charaktere chemického zloženia atmosféry Zeme,

pokladám v úvode práce za vhodné:

- stručne zmieniť, ako sa atmosféra na základe jej chemického zloženia štandardne rozdeľuje;
- v širšom zmysle popísať samotnú troposféru a klimatický systém, ktorého nedieľnou súčasťou troposféra je;

a až potom uviesť samotné dôvody, ktoré stáli za zrodom práce, z nich plynúce ciele práce a popis jej členenia. Primárnym zdrojom naštudovaných informácií, ktoré boli použité pri tvorbe nižšie uvedeného textu, bol Elektronický meteorologický slovník výkladový a terminologický (Česká meteorologická spoločnosť, 2019), ktorý je ďalej v práci uvádzaný už len ako ČeMS (2019). Tie boli doplnené o ďalšie informácie zo zdrojov príslušne citovaných v texte.

Atmosféra Zeme sa z hľadiska chemického zloženia v globálnom priestorovom meradle[†] zvykne rozdeľovať do dvoch sfér, a to na homosféru a na heterosféru. Rozdiel medzi nimi pritom spočíva v charaktere horizontálneho a vertikálneho rozloženia chemických látok v nich zastúpených, ktorý pramení z:

- rozdielnych fyzikálnych mechanizmov dominujúcich pri ich transporte, pričom:
 - v homosfére sa okrem advekcie vzduchových hmôt (typickej pre obe vrstvy) významne uplatňuje vplyv turbulentného premiešavania vzduchu (podrobnejšie sú tieto procesy popísané v samotnej práci),
 - v heterosfére vplyv turbulentného premiešavania vzduchu s rastúcou výškou rýchlo klesá a naopak narastá vplyv molekulárnej difúzie na prerozdelenie chemických látok;

*Chemizmom atmosféry, resp. chémiou atmosféry sa, ako je uvedené v ČeMS (2019), nazýva inerdisciplinárny obor medzi chémiou a meteorológiou, ktorý sa zaoberá v širšom kontexte chemickými procesmi prebiehajúcimi v zemskej atmosfére, pričom jeho významnou súčasťou je problematika chemických reakcií a transportu antropogénnych znečisťujúcich prímiesí v ovzduší. Chémiou troposféry je v práci myslená časť chemizmu atmosféry, ktorá prebieha v troposfére.

[†]Priestorové škály pohybov (procesov) v atmosfére sa zvyknú deliť na: molekulárne (do 2 mm), mikroškálové (2 mm–2 km), mezoškálové (2–2000 km), synoptické (500–10000 km) a planetárne, globálne (viac ako 10000 km), kde v zátvorkách sú uvedené typické intervaly škál týchto procesov (Jacobson, 2005).

- rozdielnej povahy slnečného žiarenia nimi prechádzajúcimi a s ich časticami interagujúcimi, keďže slnečné žiarenie – „hnací motor“ dynamiky celého klimatického systému – prechodom do stále nižších (a teda aj hustejších) oblastí atmosféry sa stáva neustále „mäkším“ (v jeho spektre neustále klesá intenzita zložiek v oblastiach krátkych vlnových dĺžok, najskôr v röntgenovej oblasti, postupne aj v oblasti ultrafialovej);
- chemickej reaktivity látok v nich zastúpených, pričom tá je závislá ako od ich samotnej vnútornej štruktúry, skúpenstva, tak aj od fyzikálnych podmienok prostredia, v ktorom sa vyskytujú (podrobnejšie je o chemizme troposféry pojednané v kapitole 1).

Homosféra, ktorej súčasťou je aj troposféra, siaha do výšky zhruba 90 km nad zemským povrchom a predstavuje riedky aerosól – jej majoritnou zložkou je zmes rôznych plynov, v ktorej sú rozptýlené kvapalné a tuhé častice. Molekulárny dusík (N_2) a molekulárny kyslík (O_2) sú v nej najzastúpenejšími plynmi, pričom v priemere cez celú homosféru tvoria viac ako 99 % jej objemu. Tieto dva plyny a taktiež vzácne plyny (argón (Ar), neón (Ne), hélium (He), kryptón (Kr), xenón (Xe)) sú v nej pritom takmer homogénne rozložené, a to ako v horizontálnom, tak aj vo vertikálnom smere (v priemere cez celú homosféru tvoria viac ako 99,95 % jej objemu). Ich objemové percentá sú pritom prakticky rovnaké s tými, ktoré tvoria tzv. suchú a čistú atmosféru a sú uvedené tab. 1. Takéto homogénne rozloženie je výsledkom:

- vyššie uvedenej advekcie vzduchu a jeho turbulentného premiešavania,
- chemickej inertnosti vzácnych plynov,
- majoritného zastúpenia N_2 a O_2 , a to i napriek ich chemickej reaktivite.

Zastúpenie ostatných plynov a aerosólov* či už biogénneho, alebo antropogénneho pôvodu sa vyznačuje časovou a priestorovou premenlivosťou, ktorá avšak vďaka ich relatívne malému zastúpeniu obvykle príliš neovplyvňuje chemické zloženie homosféry. Výnimkou je vodná para (vyskytujúca sa najmä v troposfére), ktorej zastúpenie v oblastiach teplého a vlhého vzduchu môže dosahovať až 4 – 5 objemových percent (na úkor menšieho zastúpenia najmä N_2 a O_2).

V heterosfére, ktorá leží nad homosférou, dochádza molekulárnou difúziou k ustanovovaniu difúznej rovnováhy – jej štruktúru si je v hrubom priblížení možné predstaviť ako vrstvy plynov v rôznom stupni ionizácie, v ktorých s rastúcou výškou nad zemským povrchom dominujú plyny so stále menšou molekulovou hmotnosťou. Najvyššia vrstva, ktorá plynulo prechádza do medziplanetárneho priestoru, je tvorená najmä vodíkom a nabitými časticami. Ionizácia plynov je pritom spôsobená ich interakciami s fotónmi slnečného žiarenia z krátkovlnných oblastí jeho spektra.

*Aerosólmi sa všeobecne označujú tuhé či kvapalné častice v atmosfére. V závislosti od ich priemeru (presnejšie od ich aerodynamického priemeru), d_p , sa zvyknú deliť na tzv. jemnú a hrubú frakciu, pričom prvá z nich pokrýva častice aerosólov s $d_p \leq 2,5 \mu\text{m}$, druhá častice s $d_p > 2,5 \mu\text{m}$ (Seigneur, 2019; Jacobson, 2002; Seinfeld a Pandis, 1998). Frakcie tuhých častíc aerosólu s d_p menším alebo nanajvyš rovným istej hodnote d_p sa zvyknú označovať ako častice PM_{d_p} , kde PM je skratka z anglického termínu *particulate matter*, ako je uvedené v ČeMS (2019). Bežne sa pritom používajú hodnoty d_p rovné: 0,1; 1; 2,5 a 10 μm .

Plyn	Chemický vzorec	Objemové %	Plyn	Chemický vzorec	Objemové %
Dusík	N ₂	78,084	Vodík	H ₂	0,00005
Kyslík	O ₂	20,9476	Oxid dusný	N ₂ O	0,00005
Argón	Ar	0,934	Xenón	Xe	0,0000087
Oxid uhličitý	CO ₂	0,0314	Oxid siričitý	SO ₂	0 – 0,0001
Neón	Ne	0,001818	Ozón	O ₃	0 – 0,000007 (leto)
Hélium	He	0,000524			0 – 0,000002 (zima)
Metán	CH ₄	0,0002	Oxid dusičitý	NO ₂	0 – 0,000002
Kryptón	Kr	0,000114	Amoniak	NH ₃	stopy

Tabuľka 1: Objemové percentá najzastúpenejších plynov v čistej a suchej atmosfére. Zdroj: ČeMS (2019).

Troposféra, najnižšie ležiaca vrstva atmosféry Zeme, je v priamom kontakte so všetkými zložkami klimatického systému (hydrosférou, kryosférou, biosférou, pedosférou a vrchnou časťou litosféry). Slúži tak ako „plynné“ médium, pomocou ktorého je sprostredkovaný prenos energie a hmoty (vrátane polutantov*) ako medzi nimi samotnými, tak zároveň medzi nimi a stratosférou (vrstvou atmosféry ležiacou nad troposférou, ktorá je od nej oddelená tropopauzou). Tento prenos je pritom realizovaný prostredníctvom veľkého množstva lineárnych i nelineárnych procesov, ktoré prebiehajú na veľkej škále priestorových mierok, a to (Jacobson, 2005):

- od mierky molekulárnej (napr. molekulárnou difúziou či chemickými reakciami),
- cez mierku: mikroškálovú (napr. turbulenciou či vývojom kopovitej oblačnosti), mezoškálovú (napr. gravitačnými vlnami[†], búrkami, lokálnymi systémami prúdenia vzduchu, znečisťovaním ovzdušia v urbanizovaných oblastiach), synoptickú (napr. vývojom tlakových výší a níží, frontálnych systémov, tropických cyklón),
- až po mierku planetárnu (napr. globálnymi systémami prúdenia vzduchu či Rossbyho vlnami),

pričom niektoré z procesov prebiehajú na priestorových škálach pokrývajúcich viac ako jednu z uvedených mierok (napr. biogénne znečisťovanie atmosféry je proces prebiehajúci na všetkých vyššie uvedených mierkach). Súčasne, tieto procesy prebiehajú na veľkej škále mierok časových:

- od zlomkov sekúnd (napr. chemické reakcie či mikrofyzikálne procesy),
- cez minúty, resp. desiatky minút (napr. vývoj konvektívnej oblačnosti), hodiny (napríklad vývoj superciel), týždne (napr. zadržujúce anticyklóny,

*Znečisťujúcimi prímiesami (látkami), polutantmi, ako je uvedené v ČeMS (2019), sú chemické látky, ktoré nepatria do zloženia čistej atmosféry (uvedeného v tab. 1, vrátne vodnej pary) a do ovzdušia sú emitované z prirodzených alebo z antropogénnych zdrojov v takom množstve, že v lokálnom, v regionálnom alebo v globálnom meradle menia fyzikálne, poprípade aj chemické vlastnosti vzduchu.

[†]Úvod do teórie vlnových pohybov v atmosfére je spolu s popisom základných typov vln možné nájsť napr. v knihe Pechalu a Bednára (Pechala a Bednář, 1991).

ktoré v chemizme troposféry zohrávajú významnú úlohu, ako je podrobnejšie popísané v kapitole 2), mesiace (napr. vývoj monzúnovej cirkulácie), roky a dlhšie (nap. antropogénne znečisťovanie atmosféry),

- nepretržite (napr. znečisťovanie atmosféry).

V troposfére je sústredených asi 3/4 hmotnosti celej atmosféry, pričom jej výška dosahuje v rovníkovej oblasti 16 – 18 km, v oblastiach pólou 7 – 9 km a v oblastiach stredných zemepisných šírok v priemere 11 km nad zemským povrchom. Tá sa v priebehu roka sa mení, a to tak, že vyššie sa nachádza na hemisfére s teplým obdobím roka, nižšie na pologuli s obdobím roka chladným. Podrobnejšie je o štruktúre troposféry pojednané v kapitolách 1 a 2.

Atmosféra, ako už bolo uvedené, je len jednou zo zložiek klimatického systému (ilustračne zobrazeného na obr. 1), ktorý okrem nej ďalej pozostáva z:

- hydrosféry – vodného obalu Zeme, ktorý zahŕňa všetku vodu na Zemi vo všetkých skupenstvách a formách (teda vrátane vody v atmosfére, v podvrchových vodách a v živých organizmoch);
- kryosféry – nesúvislého obalu Zeme tvoreného ľadom, snehovou pokrivkou a permafrostom (tá sa prekrýva s časťou hydrosféry, pedosféry a vrchnej litosféry);
- biosféry – obalu Zeme tvoreného živými organizmami, resp. prostredím, ktoré obývajú (jedná sa o sféru prieniku vrchnej litosféry, pedosféry, hydrosféry a troposféry);
- pedosféry – nesúvislého pôdneho obalu Zeme (tá je sférou prieniku vrchnej litosféry, prízemnej vrstvy atmosféry, hydrosféry a biosféry);
- vrchnej litosféry – vonkajšieho pevného obalu Zeme, zahŕňajúceho zemskú kôru a najvrchnejšie časti zemského plášťa;

pričom v každej z nich neustále prebieha veľké množstvo procesov (či už fyzikálnych, chemických alebo biologických), a to opäť na rôzne veľkých priestorových a časových škálach* a keďže všetky tieto zložky (vrátane atmosféry) predstavujú otvorené termodynamické systémy, k neustálej výmene hmoty a energie dochádza i medzi nimi samotnými, a to opäť prostredníctvom procesov na veľkých škálach priestorových a časových mierok. Klimatický systém tak ako celok predstavuje komplexný, nelineárny systém, ktorého „hnacou silou“ je slnečné žiarenie dopadajúce na hornú hranicu atmosféry Zeme. Jeho vývoj je pritom podmienený

*Na základe typických horizontálnych škál, h , vertikálnych škál, v , a časových škál, t , procesov uplatňujúcich sa vo vývoji klimatického systému je možné vyčleniť:

- mikroklimu: $h \in 10^{-3}$ – 10^2 m, $v \in -10$ – 10 m, $t < 10$ s;
- lokálnu klímu (topoklimu) : $h \in 10^2$ – 10^4 m, $v \in 5 \times 10^0$ – 10^3 m, $t \in 10^1$ – 10^4 s;
- mezoklimu: $h \in 10^3$ – 2×10^5 m, $v \in 5 \times 10^2$ – 4×10^3 m, $t \in 10^4$ – 10^5 s;
- makroklimu: $h > 2 \times 10^5$ m, $v \in 5 \times 10^3$ – 10^4 m, $t \in 10^5$ – 10^6 s.

Ako uvádzajú Geiger, Aron a Todhunter (1995), autori knihy, z ktorej je táto klasifikácia prevzatá, hodnoty týchto škál sú len približné a sú podmienené topografiou a vlastnosťami vrstiev ležiacich pod aktívnym povrchom.

mnohými činiteľmi (v klimatológii označovanými ako tzv. klimatické faktory), ktoré sa spravidla rozdeľujú na:

- astronomické, ktoré patria medzi tzv. radiačné klimatické faktory, pretože určujú množstvo slnečného žiarenia dopadajúceho na hornú hranicu atmosféry a jeho časové a priestorové rozloženie, pričom ich pôsobenie je spravidla globálne a dlhodobé. Spomedzi mnohých sú to najmä: vlastnosti slnečného žiarenia (intenzita, spektrálne zloženie), vlastnosti obežnej dráhy Zeme okolo Slnka (stredná vzdialenosť Zeme od Slnka, excentricita), „sférický“ tvar Zeme, sklon rotačnej osi Zeme k rovine ekliptiky a radia sa sem aj sporadické impakty Zeme s medziplanetárnymi telesami;
- geografické, ktoré sú podmienené heterogenitou prírodného prostredia v rôznych mierkach, pričom:
 - pre makroklimu je určujúci: rozsah zemepisných šírok danej oblasti, rozloženie pevnín a oceánov v nej, usporiadanie všeobecnej cirkulácie atmosféry a systému oceánskych prúdov;
 - so zmeňovaním priestorovej mierky sa uplatňuje vplyv: nadmorskej výšky, tvaru reliéfu a krajinného pokryvu;

a radí sa sem taktiež chemické zloženie atmosféry, na ktoré epizodicky pôsobí vulkanizmus;

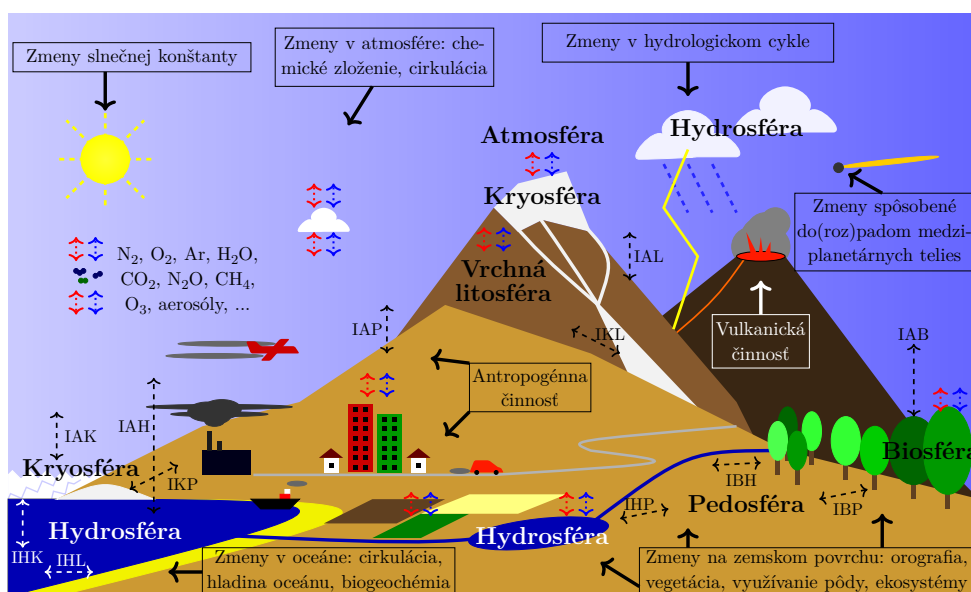
- antropogénne, ktoré sú vyvolané ľudskými zásahmi do klimatického systému. Tieto faktory pritom modifikujú najmä niektoré geografické klimatické faktory, a to:
 - od planetárnej mierky, ako napr. chemické zloženie atmosféry z pohľadu na globálne koncentrácie niektorých skleníkových plynov a atmosférických aerosólov. Na tomto mieste je ako príklady možno uviesť, že:
 - * globálna koncentrácia oxidu uhličitého (CO_2) bola v roku 1750 približne $278 \pm 1,2$ ppm* (tá bola určená na základe kalibrovaných meraní vzduchu extrahovaného z ľadovcov v Grónsku a v Antarktíde), kým v roku 2018 dosiahla pri zemskom povrchu $407,4 \pm 0,1$ ppm (Blunden a kol., 2019);
 - * globálna koncentrácia metánu (CH_4) vzrástla z hodnoty 722 ± 15 ppb, ktorú dosahovala v období roku 1750, na hodnotu $1857,7 \pm 0,8$ ppb pri zemskom povrchu v roku 2018, pričom príspevok antropogénnej činnosti k nej sa odhaduje na 60% (Blunden a kol., 2019);

*Jednotka ppm (ppb) je skratkou anglického výrazu *parts per million (billion)* a vyjadruje počet milión (miliard) látkového množstva, ktoré látka zaujíma v celkovom látkovom množstve zmesi. Analogicky k nej existuje jednotka ppmv (ppbv), ktorá odpovedá *parts per million (billion) by volume* a označuje počet milión (miliard) objemu, ktoré daná látka zaujíma v celkovom objeme zmesi.

- až po regionálne a lokálne mierky, napr. tepelnú bilanciu vyvolanú zmenami vlastností aktívneho povrchu (napríklad odlesňovaním či mestskou zástavbou) a uvoľňovaním antropogénneho tepla, resp. koncentráciu polutantov v troposfére ako dôsledok zmien ich emisie v týchto priestorových mierkach.

Okrem nich vo vývoji klimatického systému zohrávajú veľmi dôležitú úlohu tzv. klimatické spätné väzby, ktorými sa označujú reťazce navzájom podmienených reakcií zložiek klimatického systému, ktoré vznikajú v dôsledku narušenia jeho rovnováhy. Tie sa delia na kladné (pozitívne) a na záporné (negatívne), pričom prvé, resp. druhé z nich vedú vo výsledku k zosilneniu, resp. k útlmu impulzu pôvodne narušujúceho rovnováhu klimatického systému. V tomto kontexte je tak možné klimatický systém chápať ako komplexný, nelineárny systém pozostávajúci z navzájom interagujúcich vyššie menovaných geosfér, ktorého dynamika je riadená dynamikou klimatických faktorov a klimatických spätných väzieb.

Vychádzajúc z vyššie uvedeného všeobecného popisu klimatického systému, nie je teda asi vôbec prekvapujúcim napríklad Lapriseho tvrdenie (Laprise, 2008), že: „Jediným možným prístupom k hlbšiemu porozumeniu mechanizmov zodpoved-



Obrázok 1: Schéma klimatického systému. V schéme sú zvýrazneným písmom označené jeho jednotlivé zložky – atmosféra, hydrosféra, kryosféra, vrchná litosféra (ďalej len litosféra), pedosféra a biosféra. Obojstrannými prerušovanými šípkami sú naznačené niektoré zo vzájomných interakcií medzi nimi, a to medzi: atmosférou a biosférou (IAB), atmosférou a hydrosférou (IAH), atmosférou a kryosférou (IAK), atmosférou a litosférou (IAL), atmosférou a pedosférou (IAP), biosférou a hydrosférou (IBH), biosférou a pedosférou (IBP), hydrosférou a kryosférou (IHK), hydrosférou a litosférou (IHL), hydrosférou a pedosférou (IHP), kryosférou a litosférou (IKL), kryosférou a pedosférou (IKP). Červenými, resp. modrými bodkovanými šípkami sú symbolicky naznačené procesy krátkovlnného, resp. dlhovlnného žiarenia (absorpcia, emisia, odraz, rozptyl). Niektoré klimatické faktory sú uvedené v obdĺžnikoch so zvýraznenými šípkami. Schéma vychádza zo schémy v práci Baedeho a kol. (Baede a kol., 2019).

ných za udržiavanie dynamickej rovnováhy klimatického systému a jeho variability spolu s možnosťou testovania citlivosti a odozvy systému na pôsobenie jedného či viacerých klimatických faktorov je numerické modelovanie.“

Ako bude postupne poukázané v kapitole 1, chémia v troposfére (všeobecne však v celej atmosfére) je veľmi komplexná, riadená netriviálnou vzájomnou väzbou s polom žiarenia, ktoré ňou prechádza a je ňou modifikované, ako aj komplexnou vzájomnou väzbou s okamžitým fyzikálnym a chemickým stavom vzduchu (charakterizovaným meteorologickými prvkami ako napr. koncentráciou polutantov, teplotou, tlakom, či relatívnou vlhkosťou vzduchu, od ktorých sú závislé rýchlosti chemických reakcií), teda so stavom počasia (pričom všeobecnej diskusii vplyvu počasia na vývoj koncentrácie polutantov v troposfére je venovaná kapitola 2). Súčasne, koncentrácie polutantov v určitej oblasti troposféry sú okrem vyššie zmienенých aspektov prirodzene taktiež závislé od:

- ich emisie do troposféry, a to buď priamo pre tzv. primárne polutanty*, alebo nepriamo pre tzv. polutanty sekundárne;
- od depozičných procesov (závisiacich od stavu počasia prostredníctvom komplexných väzieb, o ktorých je podrobnejšie pojednané v kapitole 4), ktoré ich naopak z troposféry odstraňujú;
- samotného transportu (advekcie) vzduchových častíc a s ním spätých procesov, ako napr. turbulencie (podmienennej opäť netriviálnymi väzbami so stavom počasia, ktoré sú popísané v kapitolách 3 a 4).

Celkovo je tak vzájomné prepojenie medzi procesmi chemickými na strane jednej a procesmi transportnými (a všeobecne fyzikálnymi) na strane druhej značne komplexné a nie je možné ho študovať inak ako pomocou aparátu numerického modelovania atmosféry.

V tomto ohľade dnes existuje viacero spôsobov, ako takéto komplexné prepojenie študovať na regionálnych priestorových mierkach, o čom je podrobnejšie pojednané v kapitole 4. Jedným z nich, pomocou ktorého boli realizované simulácie v mojej práci, je tzv. *offline* prepojenie modelu regionálneho klimatického s modelom chemickým transportným. Konkrétne, v diplomovej práci bolo toto prepojenie realizované medzi modelmi RegCM 4.6[†] a CAMx 6.50[‡] (podrobnejší popis numerických modelov slúžiacich k štúdiu klímy, ako aj popis RegCM 4.6 sú zmienené v kapitole 3; podrobnejší popis modelu CAMx 6.50, ako aj detailnejší popis jeho *offline* prepojenia s modelom RegCM 4.6 sú popísané v kapitole 4). Stručne, *offline* prepojenie spočíva v jednosmernom previazaní týchto dvoch modelov, kedy výstupy z regionálneho klimatického modelu (polia meteorologických prvkov) sú použité ako jedny zo vstupných dát do modelu chemického transportného, kde slúžia ako riadiace polia pre chemické procesy a transport.

*Primárne polutanty sú znečisťujúce prímеси, ktoré sú do atmosféry emitované priamo z biogénnych, ako aj z antropogénnych zdrojov; sekundárne polutanty sú znečisťujúce prímеси, ktoré vznikajú v atmosfére chemickými reakciami z polutantov primárnych.

[†]RegCM je skratka pre *Regional Climate Model*, regionálny klimatický model použitý v práci. Skratkou RegCM 4.6 je v diplomovej práci myslená jeho verzia 4.6, ktorá bola konkrétne použitá.

[‡]CAMx je skratka pre *Comprehensive Air quality Model with extensions*, chemický transportný model použitý v práci. Skratkou CAMx 6.50 je v diplomovej práci myslená jeho verzia 6.50, ktorá bola konkrétne použitá.

Chemizmus troposféry ako taký je natoľko komplikovaný, že dodnes existujú značné neistoty pri detailnom popise chemických procesov, ku ktorým pri ňom dochádza, a to nielen pri chemických reakciách vo fáze plynnej, ale o to viac pri chémii aerosólov, teda pri reakciách heterogénnych (o čom je pojednané v kapitole 1). To prirodzene vnáša neistoty do chemických mechanizmov, pomocou ktorých sú tieto procesy numericky modelované. Súčasne, samotný spôsob konštrukcie týchto mechanizmov (o ktorých je bližšie pojednané v kapitole 4) spolu so spôsobmi ich numerického riešenia vnášajú do modelovania chémie ďalšie neistoty.

Odhliadnúc od týchto faktov, modelovanie chemizmu na regionálnej priestorovej mierke pomocou prepojených modelov regionálnych klimatických s modelmi chemickými transportnými je ďalej poznamenané veľkými neistotami, ktoré pramenia zo spôsobu samotného numerického riešenia dynamiky atmosféry v modeloch regione klimatických, keďže (ako bolo zmienené vyššie) výsledky z ich simulácií (tj. polia meteorologických prvkov) slúžia pri *offline* prepojení ako riadiace polia chémie a transportu v modeloch chemických transportných. Stručne, fyzikálne procesy kľúčové pre transport a chémiu (napr. procesy radiačné či mikrofyzikálne) sú v modeli regionálnom klimatickom v princípe nerozlíšiteľné, pretože prebiehajú na priestorových a časových škálach menších, ako je priestorové a časové rozlíšenie samotného modelu. Sú tak do numerickej integrácie modelu zakomponované pomocou rôznych schém, ktoré sa označujú ako parametrizácie (podrobnejšie je o nich pojednané v kapitole 3). Rozdielny prístup k popisu modelmi nerozlíšiteľných fyzikálnych procesov a taktiež často rozdielnych spôsobov ich numerickej implementácie v jednotlivých parametrizáciách toho istého typu fyzikálnych procesov, ktoré sú do modelu zabudované (napr. v dvoch rozdielnych parametrizáciách turbulencie v medznej vrstve atmosféry) majú za celkom očakávaný následok, že pri použití 2 rozdielnych parametrizácií toho istého typu fyzikálnych procesov v 2 simuláciách s inak identickým nastavením ostatných parametrov budú polia meteorologických prvkov produkovaných modelom v týchto 2 simuláciách rozdielne. O čo viac, v dôsledku existencie všeobecne komplexných nelineárnych vzájomných väzieb medzi rôznymi typmi fyzikálnych procesov v klimatickom systéme je celkom logické predpokladať, že rozdiely polí meteorologických prvkov produkovaných modelom v 2 simuláciách, ktoré sa líšia v dvoch, či vo viacerých parametrizáciách rôznych typov fyzikálnych procesov (napr. v parametrizáciách mikrofyziky a turbulencie v medznej vrstve atmosféry) pri inak identickom nastavení parametrov ostatných sú len málo predvídateľné.

Preto k objektívnemu zhodnoteniu možných dopadov zmien parametrizácií fyzikálnych procesov v konkrétnom klimatickom modeli na schopnosť jeho prediktability klimatických podmienok, a to či už na kratších alebo dlhších časových škálach je nutné zrealizovať testovacie simulácie s použitím rôznych typov parametrizácií a výsledky z nich validovať s dátami nameraných meteorologických prvkov. Prirodzene, rozdiely v poliach týchto prvkov (získaných zo simulácií regionálne klimatickým modelom pri použití rozdielnych parametrizácií fyzikálnych procesov) sa musia viac či menej odzrkadliť aj v zmenách koncentrácie chemických látok určených pomocou simulácií modelom chemickým transportným, ktoré sú týmito poliami riadené. Vzhľadom ku vyššie zmienenej komplexnosti vzájomnej väzby medzi transportnými procesmi a procesmi chemickými, je opäť jedinou možnosťou, ako objektívne posúdiť dopady zmien parametrizácií fyzikálnych procesov na chemizmus, zrealizovať tieto simulácie pomocou modelu chemicko

transportného a tie validovať s dátami pozorovanými.

Problematika súvisiaca s pôsobením emisií polutantov (a to nielen skleníkových plynov) v troposfére na vývoj klimatického systému na rôzne dlhých časových škálach a jeho možných dopadoch na ekosystémy či na kvalitu života ako v globálnom meradle, tak v konkrétnych regiónoch na Zemi je veľmi aktuálna, a to nie len vo vedeckých kruhoch, ale čím ďalej sa dostáva i do povedomia širšej verejnosti. Jediným možným spôsobom, ako je možné tieto dopady študovať je pomocou numerického modelovania klimatického systému, čo prirodzene kladie nároky na schopnosť modelov (resp. ich prepojení) ich relevantne popísať, čo sa nezaobíde bez ich testovania. Práve uvedené skutočnosti spolu s tými, uvedenými vyššie sú dôvodmi, ktoré stáli za vznikom mojej diplomovej práce. Motiváciou k výberu tejto diplomovej práce bol môj osobný záujem o chémiu všeobecne a taktiež túžba po hlbšom porozumení princípov modelovania klimatického systému a chemicko-transportných procesov prebiehajúcich v atmosfére, praktickom použití týchto modelov a prípadnom budúcom uplatnení v tejto oblasti výskumu.

Cieľmi diplomovej práce, vychádzajúc z jej zadania, bolo pritom:

- zoznámiť sa s regionálnym klimatickým modelom RegCM 4.6 a s fyzikálnymi parametrizáciami do neho zabudovaných, ďalej sa zoznámiť s chemickým transportným modelom CAMx 6.50 a so spôsobom jeho napojenia s modelom RegCM 4.6;
- realizovať simulácie regionálnej klímy pomocou RegCM 4.6 s cieľom validácie meteorologických podmienok pri rôznych voľbách parametrizácií: medznej vrstvy, konvekcie, tvorby zrážok a podobne,
- realizovať chemické behy modelom CAMx 6.50 s použitím výsledkov simulácií modelom RegCM 4.6 ako riadiacich meteorologických polí,
- analyzovať koncentrácie znečisťujúcich látok z modelu CAMx 6.50 pri aplikácii rôznych parametrizácií meteorologických procesov a porovnať ich s povrchovými meraniami a družicovými dátami.

Kvôli prehľadnosti a lepšej orientácii v nasledujúcich kapitolách pokladám za vhodné uviesť ich stručný popis. V 1. kapitole je prehľadne zhrnutý základný popis štruktúry troposféry a chemizmus plynnej fázy a aerosólov. Kapitola 2. je venovaná diskusii vplyvu počasia na zmeny koncentrácie polutantov v troposfére. Kapitola 3. je venovaná úvodu do klimatického modelovania, popisu modelu RegCM 4.6 a výbraným parametrizáciami do neho zabudovaných, ktoré boli použité k simuláciám v tejto práci. V 4. kapitole je prehľadne popísaný model CAMx 6.50, všeobecný spôsob napojenia regionálnych klimatických modelov na modeli chemicko-transportné a spôsob *offline* napojenia modelu CAMx 6.50 na model RegCM 4.6, ktorý bol použitý k tvorbe chemických behov. Porovnaniu vybraných klimatických prvkov získaných zo simulácií modelom RegCM 4.6 a ich validácii je venovaná 5. kapitola. V poslednej, 6. kapitole sú zhrnuté výsledky analýzy koncentrácie znečisťujúcich látok zo simulácií modelom CAMx 6.50, ich porovnanie so staničnými meraniami a s družicovými dátami.

1. Troposféra – štruktúra a chemizmus

V troposfére neustále prebieha obrovské množstvo chemických reakcií či už v dôsledku interakcie chemických látok so žiarením, tak medzi chemickými látkami samotnými, pričom môže ísť o reakcie homogénne, kedy sú všetky reaktanty aj produkty reakcie v rovnakej fáze, tak o reakcie heterogénne, kedy sú jednotlivé reaktanty alebo ich produkty vo fázach rôznych. Prirodzene, všetky tieto reakcie vedú k zmene jej chemického zloženia, avšak, ako už bolo zmienené v úvode, koncentrácie samotných reaktantov sú vo väčšine prípadov natolko malé, že aj produkty nimi vznikajúce predstavujú taktiež zväčša iba malú frakciu troposféry. Ako ilustračné príklady tejto skutočnosti sú v tab. 1.1 uvedené koncentrácie niektorých anorganických i oranických plynov v čistej a v znečistenej troposfére. I napriek tomu, tieto zmeny koncentrácie polutantov pôsobia na vývoj klimatického systému, a to napr. prostredníctvom vzájomnej väzby medzi chemickými látkami a poľom žiarenia, čím v ňom modifikujú radiačnú rovnováhu. Tá sa premieta do zmien tepelnej rovnováhy zemského povrchu, ktorá (ako bude v práci ďalej zmienené) je pre vývoj klimatického systému kľúčová.

V rámci 1. podkapitoly je prehľadne popísaná štruktúra troposféry. V podkapitole 2. je stručne popísaný chemizmus vo fáze plynnej, konkrétne teda chemizmus oxidu dusičitého (NO_2), ozónu (O_3) a oxidu siričitého (SO_2), keďže práve tieto tri plyny sú v práci podrobnejšie analyzované. V 3. podkapitole je stručne popísaný chemizmus aerosólových častíc, keďže i tie sú v práci analyzované. Hlavnými zdrojmi informácií pri štúdiu a následnej tvorbe podkapitol boli: Jacobsonova kniha (Jacobson, 2002) v prípade 1. a 2. podkapitoly, kniha Seinfelda a Pandisa (Seinfeld a Pandis, 1998) v prípade 2. podkapitoly a Seigneurova kniha (Seigneur, 2019) v prípade 3. podkapitoly. Tie boli doplnené o informácie z ďalších patrične citovaných zdrojov.

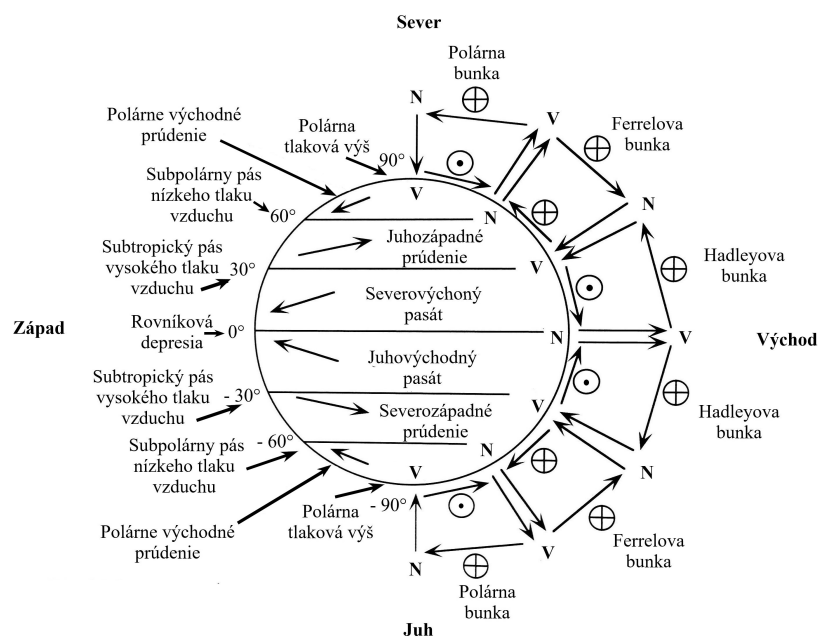
Plyn	Chemický vzorec	Koncentrácia [ppbv]	
		Čistá troposféra	Znečistená troposféra
Anorganický			
Oxid uhoľnatý	CO_2	40–200	2000–10000
Ozón	O_3	10–100	10–350
Oxid siričitý	SO_2	0,02–1	1–30
Oxid dusnatý	NO	0,005–0,1	0,05–300
Oxid dusičitý	NO_2	0,001–0,3	0,2–200
Organický			
Metán	CH_4	1800	1800–2500
Etán	C_2H_6	0–2,5	1–50
Etén	C_2H_4	0–1	1–30
Formaldehyd	HCHO	0,1–1	1–200
Toluén	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$	—	1–30
Xylén	$\text{C}_6\text{H}_4(\text{CH}_3)_2$	—	1–30

Tabuľka 1.1: Koncentrácie vybraných anorganických a organických plynov v čistej a v znečistenej troposfére. Údaje boli prevzaté z knihy Jacobsona (Jacobson, 2002).

1.1 Štruktúra troposféry

Predstavu o dominujúcich smeroch pohybu vzduchu v troposfére a z nich plynúceho rozloženia tlaku vzduchu v planetárnej mierke vystihuje všeobecná cirkulácia atmosféry, ktorej schéma je zobrazená na obr. 1.1. Tá, ako je uvedené v ČeMS (2019), je pritom dôsledkom meridionálnych rozdielov bilancie žiarenia na Zemi, rotácie Zeme, trenia a nerovnomerného rozloženia pevnín a oceánov. Vplyv posledného menovaného faktora sa prejavuje ďalšími zložkami cirkulácie ako v planetárnej mierke (napr. Walkerovou cirkuláciou), tak v kontinentálnej mierke (napr. monzúnovou cirkuláciou), ktoré v tejto schéme zahrnuté nie sú.

Troposféra sa vo vertikálnom smere štandardne delí na medznú vrstvu atmosféry (MVA) a na voľnú troposféru (VT). MVA siaha do výšok zhruba 500–3000 m nad povrchom Zeme, VT sa nachádza nad ňou. V MVA sa prejavuje vplyv trenia vzduchu o zemský povrch, resp. jeho nerovnomerného ohrevu od aktívneho povrchu vznikom mechanickej, resp. termickej turbulencie a konvekcie. Je pre ňu typická rýchla odozva pri zmenách meteorologických podmienok (do menej ako hodiny) v priebehu celého dňa, a to prostredníctvom zmien toku hybnosti, tepla, vlhkosti a taktiež aj polutantov vo vzduchu. Vo VT nie je prúdenie vzduchu významne ovplyvnené trením atmosféry o povrch Zeme a jeho rýchlosť je možné



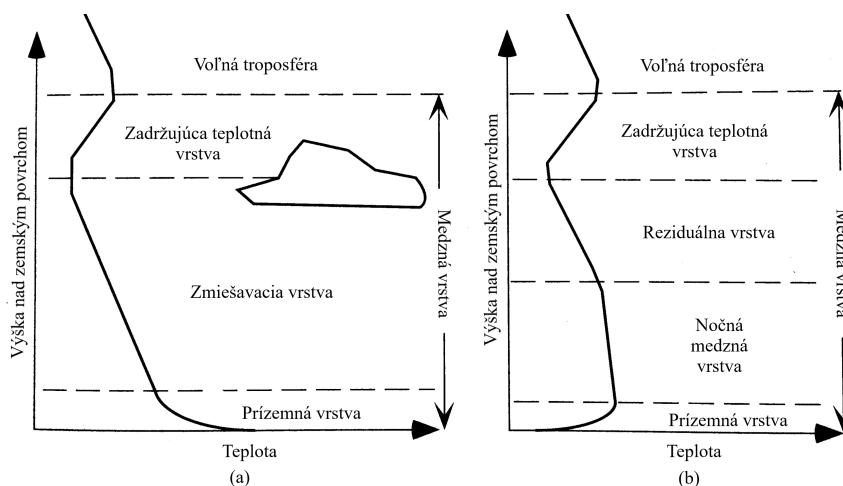
Obrázok 1.1: Schéma všeobecnej cirkulácie atmosféry. Napravo sú šípkami naznačené prevládajúce smery vertikálneho a meridionálneho prúdenia vzduchu v rámci Hadleyových, Ferellových a polárnych buniek na oboch hemisférach Zeme, symboly \odot , resp. \oplus v nich označujú prevládajúce smery zonálneho prúdenia (pred, resp. za rovinu nákresu), symbolmi **N**, resp. **V** sú vyznačené oblasti nízkeho, resp. vysokého tlaku vzduchu. Uprostred sú šípkami naznačené prevládajúce smery prúdenia v spodných vrstvách troposféry spolu s ich názvami. Naľavo sú uvedené pomenovania jednotlivých oblastí a hodnoty zemepisných šírok naznačených rovnobežiek, pričom pre južnú pologuľu sú použité záporné hodnoty. Obrázok je prevzatý a upravený z knihy Jacobsona (Jacobson, 2002).

spravidla približne aproximovať, ako sa uvádza v ČeMS (2019), geostrofickou rýchlosťou vetra. Typickým rysom vo VT je pokles teploty vzduchu v priemere o $0,65\text{ }^{\circ}\text{C}$ na každých 100 m výšky.

Ilustračné príklady vertikálneho profilu teploty vzduchu v MVA v denných a v nočných hodinách sú schématicky znázornené na obr. 1.2, v ktorých sú taktiež vyznačené niektoré ďalšie vrstvy, ktoré sa v MVA zvyknú vyčleňovať a môžu byť rôzne vyvinuté. Najnižšou je tzv. prízemná vrstva siahajúca do výšky zhruba 50–300 m nad zemským povrchom. Tá býva spravidla charakterizovaná rýchlou zmenou rýchlosti vetra s výškou (strihom vetra) a málo sa meniacou veľkosťou toku hybnosti, resp. ďalších skalárnych fyzikálnych veličín, preto sa zvykne označovať aj ako vrstva konštantného toku. Pod ňou sa za vhodných meteorologických podmienok (napr. nad ustálenou vodnou hladinou či nad uľahnutou snehovou pokrивkou pri dostatočne pomalom prúdení vzduchu, resp. pri bezvetří) môže vytvoriť tenká (rádovo milimetrová až centimetrová) laminárna vrstva. Nad prízemnou vrstvou sa nachádza zmiešavacia vrstva, ktorá siaha po spodnú hranicu prvej zadržujúcej teplotnej vrstvy, pričom v tejto vrstve, ako sa uvádza v ČeMS (2019), odpovedá vertikálny gradient teploty buď instabilnému, indiferentnému, alebo mierne stabilnému teplotnému zvrstveniu*. Zadržujúcimi teplotnými vrstvami sa súhrnne označujú vrstvy s výškovou teplotnou inverziou alebo izotermiou[†], ale aj vrstvy s malým poklesom teploty vzduchu v porovnaní s nižšie a vyššie ležiacimi vrstvami, ktoré tvoria prekážku výstupným pohybom vzduchu a jeho turbulent-

*Stabilita atmosféry je jedným zo základných pojmov dynamickej meteorológie slúžiaci k popisu miery rozvoja vertikálnych pohybov v atmosfére a s ním súvisiacim prenosom hybnosti, tepla a iných skalárnych veličín. Podrobnejší popis o stabilite atmosféry je možné nájsť napr. v knihe Pechalu a Bednářa (Pechala a Bednář, 1991).

[†]Teplotnou inverziou vzduchu, ako sa uvádza v ČeMS (2019), sa označuje prípad vertikálneho rozloženia vzduchu v určitej vrstve atmosféry, v ktorej teplota s rastúcou nadmorskou výškou vzrastá; izotermiou sa označuje teplotné zvrstvenie vzduchu vo vrstve, pri ktorom sa s rastúcou nadmorskou výškou nemení teplota vzduchu.



Obrázok 1.2: Schémy vertikálneho teplotného profilu v medznej vrstve atmosféry. Uvedené profily odpovedajú denným (a) a nočným (b) hodinám nad pevninou v oblastiach vyššieho tlaku vzduchu, t. j. v hrebeňoch vyššieho tlaku vzduchu, resp. v anticyklónach. Obrázok je prevzatý a upravený z knihy Jacobsona (Jacobson, 2002).

nému premiešavaniu. V noci spravidla dochádza ku stabilizácii MVA radiačným ochladzovaním zemského povrchu (ale aj vzduchu) a súčasným ochladzovaním prilahlých spodných vrstiev vzduchu turbulentným premiešavaním. V MVA sa tak vytvára inverzná vrstva alebo vrstva s teplotnou izotermiou (označené na obr. 1.2 (b) ako Prízemná vrstva). Vyššie položená premiešavacia vrstva sa útlmom turbulencie v noci transformuje na tzv. „nočnú medznú vrstvu“ (v anglicky písanej literatúre sa pre ňu používa termín *nocturnal boundary layer*) a nepretransformovaná zmiešavacia vrstva s výrazným turbulentným premiešavaním aj počas noci sa označuje ako reziduálna vrstva (Jacobson, 2002). Podrobnejšie je štruktúra troposféry stredných zemepisných šírok na synoptickej priestorovej mierke popísaná v kapitole druhej.

1.2 Chemizmus v plynnej fáze

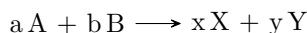
Rozsah teploty a tlaku vzduchu v troposfére a zároveň nízke koncentrácie väčšiny druhov plynov sú hlavnými príčinami fotochemickej povahy troposférického chemizmu v plynnej fáze, kde zásadnú úlohu zohrávajú *fotolytické reakcie* (fotolýza) a *reakcie radikálové*. Pri fotolytických reakciách dochádza k štiepeniu väzieb v molekulách plynov interakciou s krátkovlnným žiarením za vzniku radikálov*, pri radikálových reakciách je iniciátorom štiepenia väzieb v molekulách plynov niektorý z radikálov. Z hľadiska kinetiky týchto reakcií (rýchlosti reakcie a podmienok, ktoré ju ovplyvňujú) sú v troposfére najvýznamnejšie reakcie: 1., 2. a 3. poriadku†.

Fotolytické reakcie sú reakciami 1. poriadku. Ich rýchlosť závisí od vnútornej štruktúry molekúl plynov a z nej plynúcej schopnosti interakcie so žiarením určitej vlnovej dĺžky, λ , (tá sa vyjadruje veľkosťou účinného prierezu, σ , a kvantového výťažku fotolýzy, t. j. pravdepodobnosťou, že ku fotolýze dôjde) a ďalej od ich koncentrácie a od hustoty žiarenia. Pre predstavu sú na obr. 1.3 zobrazené závislosti kvantového výťažku a dekadického logaritmu účinného prierezu, $\log \sigma$, pre niektoré fotolytické reakcie prebiehajúce ako v troposfére, tak v stratosfére.

Radikálové reakcie sú reakciami 2. poriadku, resp. poriadkov vyšších. Rýchlostná konštanta týchto reakcií vždy závisí od teploty (čo je pre niektoré významné

*Radikálmi sa označujú veľmi reaktívne chemické látky (atómy, molekuly alebo ióny) s nespáreným(i) elektrónom(mi). V práci je(sú) v chemických reakciách pri radikáloch voľný(é) elektrón(y) označený(é) symbolom(mi) · pri príslušnom(ných) atóme(och) s takýmto(mito) elektrónom(mi). V texte takéto označenie (až na výnimky) použité nie je, no v niektorej z jeho pasáží je zmienené, že daná chemická látka predstavuje radikál.

†Poriadkom reakcie sa označuje súčet stechiometrických koeficientov reaktantov do nej vstupujúcich, napr. reakcia:



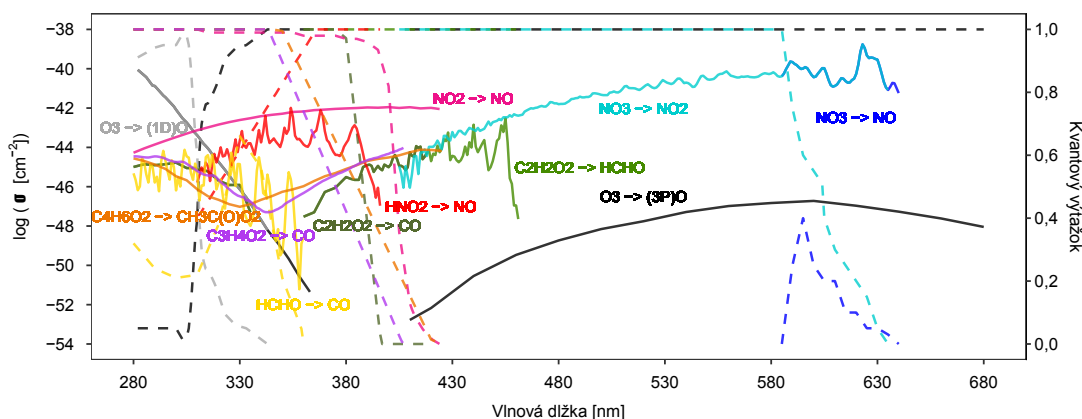
je (a+b)-tého poriadku. Rýchlosť reakcie, v , sa všeobecne definuje ako časový úbytok (prírastok) koncentrácie ľubovoľného z reaktantov (produktov) s prihliadnutím k stechiometrii danej reakcie a vyjadruje sa súčinom rýchlostnej konštanty, k , a koncentrácií nezreagovaných reaktantov, opäť s prihliadnutím k stechiometrii reakcie. Rýchlosť vyššie uvedenej reakcie je:

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{x} \frac{d[X]}{dt} = \frac{1}{y} \frac{d[Y]}{dt} = k[A]^a [B]^b,$$

kde: [A], [B], [X], [Y] sú koncentrácie látok A, B, X, Y; a, b, x, y sú stechiometrické koeficienty, d/dt je operátor časovej derivácie a k je rýchlostná konštanta (Seinfeld a Pandis, 1998).

troposférické reakcie ilustrované na obr. 1.4), a preto aj ich rýchlosti od nej závisia. V troposfére sú pritom najbežnejšie radikálové reakcie 2. poriadku. Dôležitú úlohu zohrávajú aj reakcie dvoch látok, kedy z nich vznikajúci produkt je v excitovanom (metastabilnom) stave. Ten sa môže buď spätne rozpadnúť na pôvodné reaktanty, resp. nové produkty, alebo môže dôjsť k jeho stabilizácii odovzdaním nadbytočnej energie inej chemickej látke – „stabilizátoru“, ktorý sa chemicky nemení (najčastejšie molekulám N_2 alebo O_2). Takýto dvojstupňový mechanizmus je možné považovať za reakciu 3. poriadku, ktorej rýchlosť je okrem teploty vzduchu závislá aj od tlaku vzduchu (prostredníctvom jej závislosti od koncentrácie „stabilizátora“). Reakcie vyšších poriadkov sú možné, avšak, v troposfére málo pravdepodobné, a preto nie sú v ďalšom texte brané do úvahy.

Súčasne, kvôli veľkému zastúpeniu O_2 a výskytu vodných pár je troposféra oxidačným prostredím, t. j. chemické látky do nej vstupujúce zo zdrojov (teda primárne polutanty) sa v nej majú tendenciu chemicky transformovať na polutanty sekundárne tak, že pri týchto procesoch dochádza k naväzovaniu atómov kyslíka do ich molekúl.



Obrázok 1.3: Závislosť dekadického logaritmu účinného prierezu $\log \sigma$ (plné čiary) a kvantových výťažkov (prerušované čiary) od vlnovej dĺžky žiarenia pre fotolýzu: ozónu na O_2 a atomárny kyslík v základnom stave (3P O) – čierne čiary (označenie: $O_3 \rightarrow (^3P)O$), ozónu na O_2 a atomárny kyslík v excitovanom stave (1D O) – šedé čiary (označenie: $O_3 \rightarrow (^1D)O$), oxidu dusičitého na oxid dusnatý (NO) a 3P O – ružové čiary (označenie: $NO_2 \rightarrow NO$), nitrátového radikálu (NO_3) na NO_2 a 3P O – belasé čiary (označenie: $NO_3 \rightarrow NO_2$), NO_3 na NO a O_2 – modré čiary (označenie: $NO_3 \rightarrow NO$), kyseliny dusitej (HNO_2) na NO a hydroxylový radikál (OH) – červené čiary (označenie: $HNO_2 \rightarrow NO$), formaldehydu (HCHO) na oxid uhoľnatý (CO) a molekulárny vodík (H_2) – žlté čiary (označenie: $HCHO \rightarrow CO$), glyoxálu (etándiálu) na CO a hydroperoxylové radikály (HO_2) – tmavozelené čiary (označenie: $C_2H_2O_2 \rightarrow CO$), glyoxálu na HCHO a CO – svetlozelené čiary (označenie: $C_2H_2O_2 \rightarrow HCHO$), biacetylu (bután-2,3-diónu) na acetylperoxylové radikály ($CH_3C(O)O_2$) – oranžové čiary (označenie: $C_4H_6O_2 \rightarrow CH_3C(O)O_2$) a metylglyoxálu (2-oxopropanálu) na CO, HO_2 a acetylperoxylový radikál – fialové čiary (označenie: $C_3H_4O_2 \rightarrow CO$). Účinné prierezy, σ , z ktorých sú vyjadrené logaritmy sú v jednotkách cm^{-2} , vlnová dĺžka žiarenia je uvedená v nanometroch (nm). Dáta boli prevzaté z Carterovej správy (Carter, 1999).

Hlavné rysy chemizmu v plynnej fáze je možné popísať následne:

- V závislosti od chemickej štruktúry plynu a z nej plynúcej fotochemickej reaktivity je v denných hodinách buď fotolýza, alebo reakcia s niektorým z radikálov, popr. oba typy reakcií, tzv. iniciačnou (spúšťacou) reakciou, pri ktorých vznikajú radikály.
- Radikály vznikajúce iniciačnými reakciami sa stávajú reaktantami reakcií ďalších, tzv. propagačných. Ich produkty, radikály, môžu byť reaktantami ďalších radikálových reakcií, čím dochádza ku vzniku reťazcov reakcií (otvorených aj uzavretých) rôznej dĺžky, ktoré sú navzájom komplexne prepojené.
- Propagácia (sled propagačných reakcií) môže byť v istom kroku „ukončená“ tzv. terminačnou reakciou, pri ktorej vznikajúci produkt (reakciou dvoch radikálov, popr. mechanizmom popísaným pri reakciách 3. poriadku) sa vyznačuje buď:

– dlhšou životnosťou* – tieto produkty môžu:

- * zvyšovať ich koncentráciu v danej oblasti;
- * byť prenášané (resp. rozptylované) prúdením vzduchu do vzdialenejších oblastí od ich zdrojov;

pričom v oboch prípadoch môžu:

- * slúžiť ako rezervoáre radikálov pri ich následnej iniciácii;
- * byť z troposféry odstraňované, napr. suchou depozíciou (podrobnejšie je o mechanizmoch odstraňovania chemických látok z atmosféry pojednané v podkapitole 4.1.1);

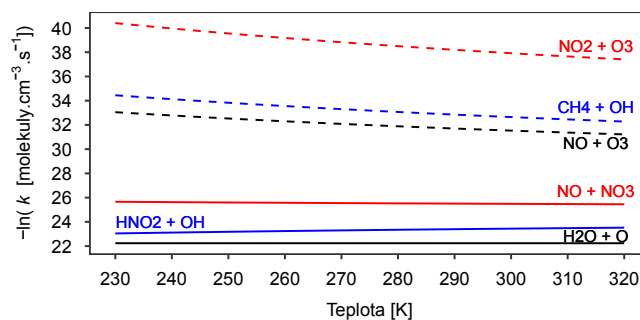
– silnou rozpustnosťou (najmä vo vode) – tieto produkty môžu:

- * vstupovať do heterogénnych reakcií;
- * byť z troposféry odstraňované, napr. mokrou depozíciou;

alebo obomi týmito vlastnosťami.

- Chemizmus plynov v nočných hodinách má rovnakú štruktúru reakcií ako v hodinách denných – iniciácia nasledovaná propagáciou a ukončená termináciou – prirodzene s tým rozdielom, že nedochádza k fotolýze. V nočných hodinách tak radikálovými reakciami klesajú koncentrácie radikálov vznikajúcich cez deň priamo fotolyticky (napr. NO) alebo od fotolýzy inej chemickej látky, resp. iných chemických látok závisiacich (napr. OH radikály, ako je popísané pri chemizme ozónu). Naopak, radikálovými reakciami vzrastajú koncentrácie radikálov, ktoré sú cez deň fotolýzou deštruované (napr. NO₃). Rozdielne zastúpenie radikálov a taktiež rozdielne fyzikálne podmienky (najmä teplota vzduchu) sú tak príčinami dominancie odlišných chemických reakcií vo dne a v noci.

*Životnosťou chemickej látky sa označuje čas potrebný k tomu, aby jej koncentrácia určitou chemickou reakciou poklesla na $1/e$ -tinu jej počiatočnej koncentrácie, kde je e je Eulerovo číslo (Jacobson, 2002).



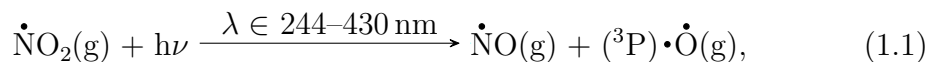
Obrázok 1.4: Závislosť prirodzeného logaritmu rýchlostnej konštanty, $\ln k$, od teploty pre reakciu: vodnej pary s (^1D)O – čierna plná čiara (označenie: $\text{H}_2\text{O} + \text{O}$), kyseliny dusitej s OH – modrá plná čiara (označenie: $\text{HNO}_2 + \text{OH}$), oxidu dusnatého s nitrátovým radikálom – červená plná čiara (označenie: $\text{NO} + \text{NO}_3$), oxidu dusnatého s ozónom – čierna prerušovaná čiara (označenie: $\text{NO} + \text{O}_3$), metánu s OH – modrá prerušovaná čiara (označenie: $\text{CH}_4 + \text{OH}$) a oxidu dusičitého s ozónom – červená prerušovaná čiara (označenie: $\text{NO}_2 + \text{O}_3$). Rýchlostné konštanty, k , z ktorých boli vytvorené logaritmy sú v jednotkách molekuly. $\text{cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$, teplota je uvedená v Kelvinoch (K). Dáta boli prevzaté zo správy Yarwoda a kol. (Yarwood a kol., 2005).

1.2.1 Chemizmus NO_2

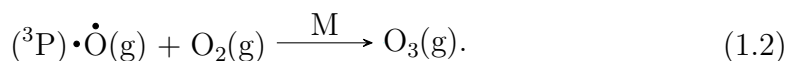
Oxid dusičitý je v plynnom skúpenstve radikál, vo vyššej koncentrácii hnedočervenej farby a je cítiť typickým silným zápachom. Pri nízkej koncentrácii má slabý vplyv na väčšinu ľudí, vo vyššej koncentrácii môže vyvolať dráždenie dýchacích ciest a pľúc, vo veľmi vysokej koncentrácii (25–100 ppmv) môže vyvolať akútnu bronchitídu. Pri koncentrácii prevyšujúcej 150 ppmv môže viesť až k usmrteniu.

Hlavnými zdrojmi NO_2 do troposféry sú: spaľovanie fosílnych palív a biomasy a fotochemické reakcie, jeho majoritnými prepadmi sú: fotochemické reakcie, rozpúšťanie do vody (najmä do oceánov) a prenos do pôdy a ľadovcov.

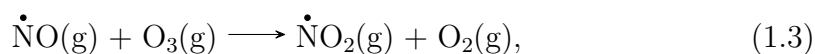
Medzi významné troposférické reakcie NO_2 patrí jeho fotolýza*:



pri ktorej vznikajú dva radikály: oxid dusnatý a atomárny kyslík v základnom stave (${}^3\text{P}$) O). Závislosť logaritmu účinného prierezu, $\log \sigma$, a kvantového výťažku od vlnovej dĺžky žiarenia pre túto reakciu je zobrazená na obr. 1.3. (${}^3\text{P}$) O môže reagovať s O_2 v prítomnosti tretej molekuly:



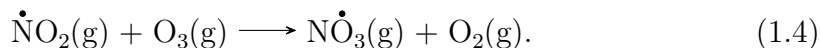
Ďalším zo zdrojov NO_2 je reakcia NO s O_3 :



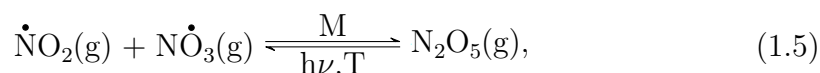
*Vo všetkých fotochemických reakciách je plynné skúpenstvo látky označené ako (g) za ich chemickým vzorcom. Vo fotolytických reakciách je kvantum žiarenia označené ako $h\nu$, prípadne je nad šípkou reakcie uvedená aj oblasť vlnových dĺžok žiarenia, λ , s ktorým k nim dochádza. „Stabilizátor“ (najčastejšie molekula N_2 alebo O_2), popísaný vyššie pri reakciách 3. poriadku, je v reakciách označený ako M a T označuje termálny rozpad pri vyšších teplotách.

pričom závislosť logaritmu rýchlostnej konštanty, $\ln k$, od teploty je pre ňu vynešená na obr. 1.4. Reakcie 1.1–1.3 vytvárajú základný fotochemický cyklus, z ktorého je evidentná vzájomná závislosť koncentrácií NO_2 , NO (súčet ich koncentrácií sa označuje ako NO_x) a O_3 .

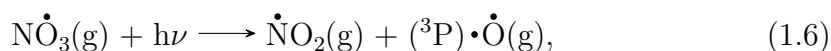
V nočných hodinách je dôležitou reakciou NO_2 s O_3 (závislosť $\ln k$ tejto reakcie od teploty je taktiež zobrazená na obr. 1.4), pri ktorej vzniká O_2 a NO_3 :



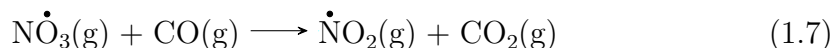
Nitrátový radikál môže reagovať v prítomnosti molekuly M s ďalšou molekulou NO_2 za vzniku oxidu dusičitého (N_2O_5):



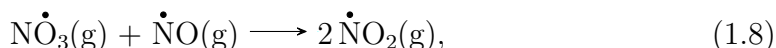
pričom táto reakcia je reverzibilná, podmienená najmä koncentráciou NO_3 , teplotou a intenzitou žiarenia. Nitrátový radikál sa cez deň ľahko fotolyticky rozkladá (závislosť $\log \sigma$ a kvantového výťažku od vlnovej dĺžky žiarenia pre túto fotolýzu je zobrazená na obr. 1.3):



a preto sú reakcie 1.4 a 1.5 prepadosť NO_2 v noci. V reakcii 1.5 sa rovnováha s rastúcou koncentráciou NO_3 a s poklesom teploty v noci posúva smerom doprava. Cez deň sa N_2O_5 fotolyticky rozkladá, čím sa stáva zdrojom NO_2 ako reakciou 1.5 v smere doľava, tak súčasne fotolýzou pri nej vznikajúceho NO_3 (reakciou 1.6). Nitrátový radikál taktiež reaguje s oxidom uhoľnatým:

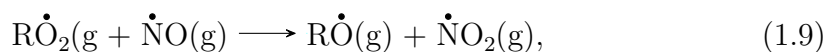


a s oxidom dusnatým (závislosť $\ln k$ tejto reakcie od teploty je vynesena na obr. 1.4):

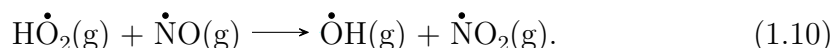


ktoré sú zdrojmi NO_2 .

Medzi ďalšie dôležité reakcie, pri ktorých vzniká NO_2 , patria reakcie typu:



kde: RO_2 je alk(ar)ylperoxylový radikál a RO je alk(ar)oxylový radikál. K týmto reakciám dochádza v priebehu fotochemickej oxidácie ROL^* , ktorá je popísaná v nasledujúcej podkapitole. Ku vzniku NO_2 dochádza (analogicky k predošlému typu reakcií) aj reakciou oxidu dusnatého s HO_2 radikálom:



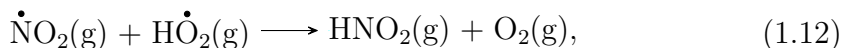
Oba radikály, OH i HO_2 , patria pritom k najreaktívnejším radikálom v chémii atmosféry.

*Skratka ROL (reaktívne organické látky) je v práci používaná ako synonymum pre nemetánové organické prchavé látky – NMVOCs (skratka z anglického termínu *Non-methane volatile organic compounds*). Tými, ako je možné nájsť v ČEMS (2019), sa označujú organické látky okrem metánu, ktorých počiatočný bod varu, meraný pri štandardnom atmosférickom tlaku 101,3 kPa, je nižší alebo rovný 250 °C.

Termináčnou reakciou NO_2 je napr. jeho reakcia s OH radikálom v prítomnosti molekuly M, pri ktorej vzniká kyselina dusičná (HNO_3):



ako aj jeho reakcia s hydroperoxylovým radikálom, kedy priamou zrážkou vzniká HNO_2 a O_2 :

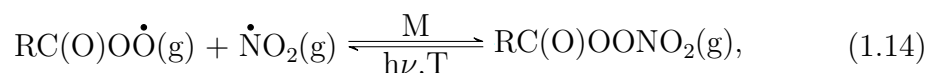


no v prítomnosti tretej molekuly M vzniká kyselina peroxydusitá (HNO_4):



Všetky tri uvedené kyseliny podliehajú fotolýze, pričom závislosť $\log \sigma$ a kvantového výťažku od vlnovej dĺžky žiarenia pre fotolýzu HNO_2 je zobrazená na obr. 1.3. Kyselina dusičná je v dôsledku jej silnej rozpustnosti vo vode veľmi dôležitou chemickou látkou v heterogénnych reakciách, ako bude popísané v chemizme aerosólov v nasledujúcej podkapitole.

V súvislosti s terminačnými reakciami NO_2 zohráva v chemizme troposféry dôležitú úlohu peroxyacetylitrát (PAN), $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{OONO}_2$, resp. od neho odvodené vyššie homológy, ktorý vzniká reakciou NO_2 s peroxyacetylovým radikálom ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\dot{\text{O}}$), resp. s peroxyalk(ar)oxylovými radikálmi ($\text{RC}(\text{O})\dot{\text{O}}$)[†]:



kde R je: metylová skupina (v prípade vzniku PAN), vyššia alk(ar)yllová skupina (v prípade vzniku vyšších homológov PAN). V plynnej fáze sú peroxyalk(ar)oxylové radikály s menším uhíkovým reťazcom, resp. s jedným aromatickým jadrom. Tieto zlúčeniny sa vyznačujú istou termickou stabilitou (najmä pri nižších teplotách) a môžu slúžiť ako rezervoár NO_2 a rôznych organických radikálov, ktoré cez deň vznikajú pri ich fotolýze, resp. ich termálnym rozpadom. Okrem toho sú to látky vyznačujúce sa toxicitou pre živé organizmy.

1.2.2 Chemizmus O_3 a ROL

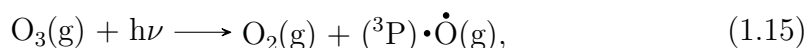
Ozón je v atmosférických podmienkach plyn, ktorý je vo vyššej koncentrácii namodralej až narúžovelej farby. Pri koncentrácii vyššej ako 0,02 ppmv je cítiť typickým štiplavým zápachom. Pri nižšej koncentrácii vyvoláva bolesti hlavy a tlak na hrudi. Pri dlhšom dýchaní vzduchu s koncentráciou O_3 prevyšujúcou 0,3 ppmv (viac ako hodinu) sa znižuje funkčnosť pľúc, dochádza k dýchacím ťažkostiam a k dráždiu ku kašľu. Ozón taktiež pôsobí ako stresor pre rastliny a môže spôsobiť až ich odumretie.

Zhruba 90 % objemu ozónu sa nachádza v stratosfére, najmä vo výškach asi 25–35 km nad zemským povrchom, zvyšných asi 10 % v troposfére a v tropopauze. Z hľadiska jeho zdrojov a prepadov v atmosfére je výnimočný tým, že sú nimi takmer výhradne fotochemické reakcie. V troposfére je do istej miery jeho zdrojom

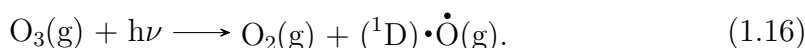
[†]Označenie (O) znamená, že atóm kyslíka je viazaný na atóm uhlíka a nie je súčasťou OO skupiny, ktorá je naviazaná na rovnaký atóm uhlíka ako (O). Odbodne je takéto značenie použité aj pri ďalších chemických látkach.

aj prenos O₃ zo stratosféry cez tropopauzu a prepadmi sú jeho transfér do pôdy, do ľadovcov a tiež jeho slabá rozpustnosť do vody (hlavne do oceánov). Ozón je silným oxidačným činidlom, sám oxiduje veľký počet rôznych druhov chemických látok v atmosfére a je zdrojom ďalších radikálov, ktoré sa podieľajú na odbúravaní znečisťujúcich látok v nej.

Medzi reakcie, pri ktorých ozón priamo vzniká, resp. zaniká a boli zmiené pri chemizme NO₂ patria reakcie 1.2, resp. 1.3 a 1.4. Ďalšou veľmi významnou reakciou O₃ v denných hodinách je jeho fotolýza, pri ktorej vzniká O₂ a atomárny kyslík buď v základnom stave (³P) O):



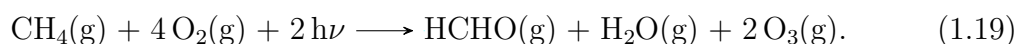
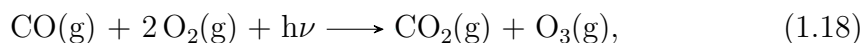
alebo v excitovanom stave (¹D) O):



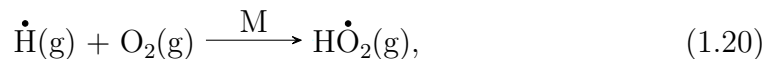
Závislosti log σ a kvantového výťažku od vlnovej dĺžky žiarenia pre obe tieto fotolýzy sú zobrazené na obr. 1.3. Vznikajúci (³P) O reaguje s O₂, pričom vzniká opäť O₃ (viď reakciu 1.2). K tejto reakcii avšak nedochádza v prípade (¹D) O. Ten buď v prítomnosti molekuly M prechádza do základného stavu, alebo môže zreagovať s vodnou parou za vzniku hydroxylových radikálov (pričom závislosť ln k tejto reakcie od teploty je zobrazená na obr. 1.4):



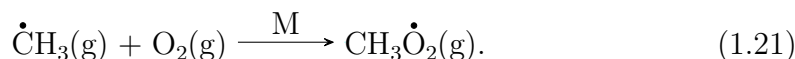
Zdrojmi O₃ sú napr. i fotochemické oxidácie CO a CH₄, ktoré je možné sumárne vyjadriť reakciami:



K oxidáciám pritom dochádza v slede reakcií, kde v prvom kroku OH radikál atakuje molekulu CO, resp. CH₄, pričom vzniká CO₂ a radikál atomárneho vodíka (H), resp. vodná para a metylový radikál (CH₃). Tieto radikály následne reagujú s O₂ v prítomnosti molekuly M za vzniku hydroperoxylového radikálu (HO₂):



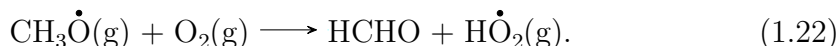
resp. metylperoxylového radikálu* (CH₃O₂):



Tie reagujú s NO za vzniku NO₂ a OH (reakciou 1.10), resp. metoxylového radikálu, CH₃O (reakciou 1.9), kde R = CH₃. V prvom prípade vzniká O₃ z NO₂

*Závislosť ln k od teploty pre sled dvoch reakcií, kedy v prvej zreaguje CH₄ s OH a v druhej vznikajúci CH₃ s O₂ na CH₃O₂ je zobrazená na obr. 1.4. Rozhodujúcou reakciou, ktorá určuje výslednú rýchlosť v tomto slede reakcií (ale aj v analogických sledoch reakcií ROL s OH, viď obr. 1.5, je práve rýchlosť ataku CH₄ s OH radikálom (analogicky ROL s OH), keďže k následnému naviazaniu O₂ na vznikajúci metylový (analogicky alk(ar)ylový) radikál dochádza v troposfére omnoho rýchlejšie (Seinfeld a Pandis, 1998).

prostredníctvom sledu reakcií 1.1 a 1.2, v prípade druhom CH_3O reaguje s O_2 za vzniku formaldehydu a HO_2 :



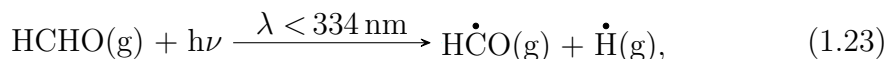
Hydroperoxylový radikál následne reaguje s NO na OH a NO_2 (reakciou 1.10). Takto vzniknuté dve molekuly NO_2 v reťazci (jedna reakciou 1.9, druhá reakciou 1.10) produkujú dve molekuly O_3 (rovnako ako v prvom prípade) sledom reakcií 1.1 a 1.2.

Uvedené fotochemické oxidácie CO_2 a CH_4 sú podmienené dostatočnou koncentráciou NO , aby radikálové reakcie s ním dominovali nad produkciou iných neutrálnych chemických látok, resp. radikálov (napr. vzájomnými reakciami medzi: OH , HO_2 , CH_3O , CH_3O_2 , popr. s NO_2 , ku ktorým taktiež dochádza). Súčasne, CO a CH_4 majú pri bežných troposférických koncentráciách OH relatívne dlhú životnosť, a tak majú tieto oxidácie väčší význam pri tvorbe O_3 vo vidieckych oblastiach (tj. v oblastiach bez významejších zdrojov emisií antropogénnych polutantov) a tiež v odľahlých oblastiach (napr. nad oceánom).

Formaldehyd, najzastúpenejší aldehyd v troposfére, je jedným z najvýznamnejších zdrojov troposférického ozónu ako v mestských, tak aj vo vidieckych a v odľahlých oblastiach, a to z dvoch dôvodov. Po prvé, jedná sa o veľmi reaktívnu zlúčeninu – rozkladá sa ako fotolyticky, tak aj reakciami s radikálmi. Po druhé, okrem toho, že je do atmosféry emitovaný (napr. zo stavebných materiálov), je medziproduktom (sekundárnym polutantom) oxidácie mnohých ROL.

Krátku životnosť pri typickom troposférickom zastúpení rôznych radikálov v mestských oblastiach na úrovni hladiny mora má formaldehyd voči atakom HO_2 a OH radikálov, ako je ilustrované v tab. 1.2.

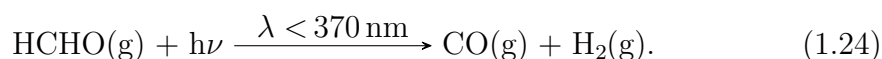
Pri fotolýze sa v závislosti od vlnovej dĺžky žiarenia rozkladá buď na formylový radikál (HCO) a H :



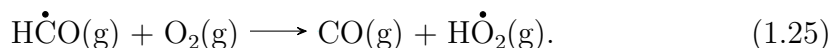
ROL	Životnosť ROL v znečistenom mestskom ovzduší na úrovni hladiny mora					
	Fotolýza	OH	HO_2	$(^3\text{P})\text{O}$	NO_3	O_3
Bután	—	22 h	1000 r	18 r	29 d	650 r
<i>trans</i> -But-2-én	—	52 min	4 r	6,3 d	4 min	17 min
Acetylén	—	3 d	—	2,5 r	—	200 d
Formaldehyd	7 h	6 h	1,8 h	2,5 r	2 d	3200 r
Acetón	23 d	9,6 d	—	—	—	—
Etanol	—	19 h	—	—	—	—
Toluén	—	9 h	—	6 r	33 d	200 d
Izoprén	—	34 min	—	4 d	5 min	4,6 h

Tabuľka 1.2: Životnosť vybraných ROL v znečistenom mestskom ovzduší na úrovni hladiny mora, kde: r sú roky, d sú dni, h sú hodiny a min sú minúty. Uvedené životnosti boli pri fotolýze určené na základe fotolytických koeficientov, pri radikálových reakciách na základe ich rýchlostných konštánt a pri ich typických koncentráciách v znečistenom ovzduší, a to: 5×10^6 , 2×10^9 , 8×10^4 , 2×10^{10} , 2×10^9 a 5×10^{12} molekúl. cm^{-3} pre: OH , HO_2 , $(^3\text{P})\text{O}$, NO_3 a O_3 v uvedenom poradí. Údaje boli prevzaté z Jacobsonej knihy (Jacobson, 2002).

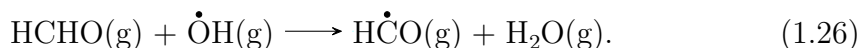
alebo na CO a H₂:



Závislosti $\log \sigma$ a kvantového výťažku od vlnovej dĺžky žiarenia pre reakciu 1.24 sú pritom zobrazené na obr. 1.3. Formylový radikál rýchlo reaguje s O₂ za vzniku CO a HO₂:



Atomárny vodík reaguje s O₂ (reakciou 1.20) taktiež za vzniku HO₂. Reakciou HCHO s OH radikálom vzniká opäť formylový radikál a vodná para:



Oxid uhoľnatý vznikajúci uvedenými reakciami je zdrojom O₃ reťazcom reakcií, ktoré sú sumárne zhrnuté reakciou 1.18. Navyše, HO₂ radikály vznikajúce jeho rozkladom sú zdrojmi OH radikálov (reakciou 1.10).

ROL predstavujú obrovskú skupinu rôznych druhov organických látok, ktoré sú do ovzdušia emitované ako z biogénnych, tak aj z antropogénnych zdrojov, no taktiež aj sekundárnych polutantov z nich v ovzduší vznikajúcich fotochemickými procesmi. Z hľadiska chemického zloženia medzi ne patria niektoré nasýtené i nenasýtené, acyklické i cyklické uhľovodíky a ich deriváty (napr. rôzne druhy alkoholov, karbonylových zlúčenín či karboxylových kyselín), ale aj aromatické uhľovodíky a ich deriváty (napr. bezén, toluén, xylény, benzaldehyd) a mnoho ďalších. Množstvo týchto látok je emitovaných aj z prírodných, aj z antropogénnych zdrojov a býva otázkou diskusie, aké množstvo danej látky pochádza z toho či onoho zdroja.

Do skupiny BROL (biogénnych reaktívnych organických látok) patria napr. izoprén (2-metylbuta-1,3-dién), produkovaný najmä opadavými stromami, acyklické aj cyklické terpény, ako sú napr. α -pipén a β -pipén (produkované ihličnatými stromami) a mnoho ďalších. Odhady globálnych emisií týchto látok sa pritom značne odlišujú, napr. Acosta a kol. (2014) uvádzajú globálny odhad ročnej emisie BROL v rozmedzí 881–1408 TgC.r^{-1*}, pričom najväčší podiel na nich má emisia izoprénu, a to v rozmedzí 309–706 TgC.r⁻¹; Šindelárová a kol. (Šindelarova a kol., 2014) určili na základe simulácií modelom MEGAN priemernú ročnú emisiu BROL v období rokov 1980–2010 na zhruba 760 TgC.r⁻¹, z ktorej tvorí: 70 % izoprén, 11 % monoterpény, 6 % metanol (CH₃OH), 3 % acetón (CH₃C(O)CH₃), 2,5 % seskviterpény a po menej ako 2 % každá z ostatných BROL. Acosta a kol. (2014) taktiež uvádzajú, že globálne emisie BROL tvoria asi 90 % z celkových emisií ROL.

Hlavné reakcie chemizmu ROL v troposfére (t. j. ich fotochemickej oxidácie) sú zhrnuté v schéme na obr. 1.5 a je ich možné stručne popísať následne:

- Iniciačnými reakciami ROL sú najmä radikálové reakcie. Fotolytické reakcie sú významnými iniciačnými reakciami najmä pre ROL obsahujúce karbonylovú skupinu (napr. aldehydy, ketóny, karboxylové kyseliny) a ďalšie

*Jednotka TgC.r⁻¹ vyjadruje emisie v zmysle hmotnosti atómov uhlíka v nich obsiahnutých, a to v teragramoch emitovaných za rok.

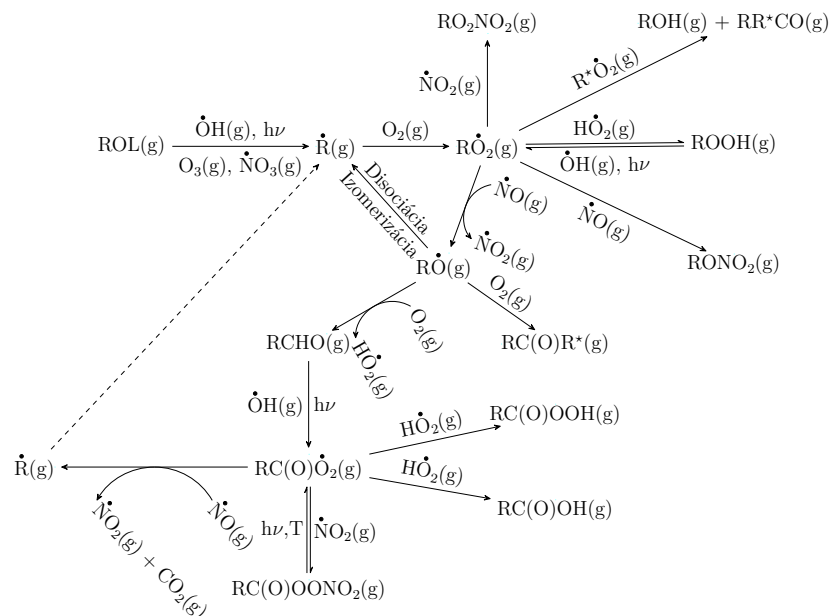
chromofóry, napr. nitrátovú (NO_2) a nitrilovú (CN) skupinu. Významnými chemickými iniciátormi sú:

- hydroxylový radikál (OH) – reaguje so všetkými primárnymi i sekundárnymi ROL, pričom pre väčšinu z nich ide o reakciu s najvyššou rýchlostnou konštantou v porovnaní s reakciami s inými radikálmi, avšak, keďže reakčná rýchlosť závisí aj od jeho koncentrácie, nemusia byť tieto reakcie najrýchlejšie (ako už bolo zmienené, koncentrácia OH rýchlo klesá v nočných hodinách a taktiež závisí od vlhkosti vzduchu, vid reakciu 1.17);
- ozón (O_3) – oxidácia ROL ozónom spočíva v jeho adícii do molekúl s násobnými uhlíkovými väzbami a ich následnom rozpade na mnohé produkty (tzv. ozonolýza) – zohráva dôležitú úlohu najmä v chemizme nenasýtených alifatických uhľovodíkov, ako sú napr. alkény, alkadiény, izoprén a terpény, a to najmä vo vyšších vrstvách troposféry, kde narastá jeho koncentrácia;
- nitrátový radikál (NO_3) – zohráva významnú úlohu v nočnom chemizme oxidácie ROL – reaguje najmä s nenasýtenými alifatickými uhľovodíkmi (obdobne ako O_3), ďalej s produktmi oxidácie izoprénu (napr. s glykolaldehydom či s metylvinylketónom), s aldehydmi a z aromatických zlúčenín napríklad s krezolmi, s nitrokrezolmi a s vyššími fenolmi.

Medzi ďalšie iniciatory patria napr. HO_2 a $(^3\text{P})\text{O}$.

- Propagačnými reakciami vzniká veľké množstvo rôznych druhov medzi-produktov, medzi ktoré patria napríklad: karbonylové zlúčeniny, alkoholy, karboxylové kyseliny či nitráty. Významnú úlohu pri propagácii zohrávajú najmä radikály: OH , HO_2 , NO , NO_2 , NO_3 , $(^3\text{P})\text{O}$, ďalej aj alk(ar)oxylové, alk(ar)ylperoxylové a peroxyacylové radikály a taktiež Criegeeho biradikály ($\text{R}_2\dot{\text{C}}\text{OO}\dot{\text{O}}$). V zložitejších molekulách s vnútorným pnutím dochádza pri propagácii taktiež ku vnútrómolekulovým prešmykom v nich (k izomerizácii), či k ich disociácii na jednoduchšie chemické látky.
- Významnú úlohu v chemizme ROL a pri transporte zohrávajú opäť termínačné reakcie, ktorými vzniká napr. PAN, HNO_3 , či peroxid vodíka (H_2O_2).
- V závislosti od chemického zloženia ROL vznikajú ich úplnou oxidáciou v troposfére najstabilnejšie oxidy, ako sú: CO_2 , H_2O , NO_2 či SO_2 .

Životnosti niektorých z ROL sú uvedené v tab. 1.2 (za predpokladov bližšie špecifikovaných v jej popise). Z nich je evidentné, že fotochemické reakcie prebiehajú na veľkej časovej škále, čo z pohľadu numerického modelovania týchto procesov, t. j. riešenia tzv. stiff sústavy obyčajných diferenciálnych rovníc (resp. sústavy obyčajných diferenciálnych rovníc so silným tlmením), kladie podmienky na numerické metódy, ktoré je možné efektívne (v zmysle dĺžky integračného kroku pri zachovaní stability) použiť pri ich riešení, ako je podrobnejšie popísané v podkapitole 4.1.2.



Obrázok 1.5: Schéma fotochemickej oxidácie reaktívnych organických látok (ROL). Jednotlivé zlúčeniny sú: $\dot{\text{O}}\text{H}$ – hydroxylový radikál, O_3 – ozón, $\dot{\text{N}}\text{O}_3$ – nitrátový radikál, $\dot{\text{R}}$ – alk(ar)ylové radikály, $\text{R}\dot{\text{O}}_2$ ($\text{R}^*\dot{\text{O}}_2$) – alk(ar)ylperoxylové radikály, $\dot{\text{N}}\text{O}_2$ – oxid dusičitý, RO_2NO_2 – organické peroxy-nitráty, ROH – alkoholy (fenoly), RR^*CO – karbonylové zlúčeniny, $\text{H}\dot{\text{O}}_2$ – hydroperoxylový radikál, ROOH – organické hydroperoxydy, NO – oxid dusnatý, $\dot{\text{R}}\text{O}$ – alk(ar)oxylové radikály, RONO_2 – organické nitráty, O_2 – molekulárny kyslík, RCHO – aldehydy, $\text{RC}(\text{O})\text{R}^*$ – ketóny, $\text{RC}(\text{O})\dot{\text{O}}_2$ – peroxyacylové radikály, CO_2 – oxid uhľičitý, $\text{RC}(\text{O})\text{OH}$ – karboxylové kyseliny, $\text{RC}(\text{O})\text{OOH}$ – peroxykarboxylové kyseliny, $\text{RC}(\text{O})\text{OONO}_2$ – peroxyacylové nitráty. V reakciách je ďalej použité značenie: (g) pre plynné skupenstvo, T pre teplotu a $h\nu$ pre elektromagnetické žiarenie. Schéma je prevzatá a upravená z knihy Seinfelda a Pandisa (Seinfeld a Pandis, 1998).

Ako je vidieť v reakčnej schéme na obr. 1.5, reakciami alk(ar)ylperoxylových a peroxyacylových radikálov s NO dochádza pri fotochemickej oxidácii ROL k produkcii NO_2 . Jeho následná fotolýza vedie rovnako, ako bolo popísané pri oxidácii CH_4 , k produkcii O_3 . Okrem toho je dôležité mať na pamäti, že samotná koncentrácia O_3 je ovplyvnená koncentráciou NO_x prostredníctvom základného fotochemického cyklu a súčasne tú skutočnosť, že pri iniciácii väčšiny ROL zohrávajú kľúčovú úlohu najmä OH radikály. Množstvo ozónu vyprodukovaného pri oxidácii ROL taktiež závisí od druhu, koncentrácií a rýchlosti produkovaných karbonylových zlúčenín, keďže fotolýzou niektorých z nich (ako je napríklad ilustrované na obr. 1.3) sa reakčná zmes obohacuje o ďalšie voľné radikály. Množstvo ozónu, ktoré oxidáciou určitej ROL vzniká je možné (na základe experimentov, numerických modelov, resp. ich kombinácie) vyjadriť viacerými spôsobmi. Jedným z nich je vyjadrenie pomocou tzv. prírastkovej reaktivity, ktorá je definovaná podielom prírastku látkového množstva ozónu vznikajúceho v reakčnej zmesi pridaním, resp. zreagovaním jednotkového látkového množstva danej ROL (Seinfeld a Pandis, 1998; Carter, 2010). Veľkou prírastkovou reaktivitou sa vyznačujú najmä nižšie alkény, alkadiény, aldehydy, izoprén a produkty jeho oxidácie (napríklad metylglyoxál a metylvinylketón), metylmetakrylát, amíny, metylnit-

ROL	Prírastková reaktivita [mol (O ₃)/mol (ROL)]	ROL	Prírastková reaktivita [mol (O ₃)/mol (ROL)]	ROL	Prírastková reaktivita [mol (O ₃)/mol (ROL)]
Etán	0,167 ± 0,045	Izoprén	3,37 ± 1,25	Metylglyoxál	4,28 ± 2,25
Propán	0,29 ± 0,07	Benzén	-0,008 ± 0,185	Metylvinylnketón	3,15 ± 1,13
Bután	0,64 ± 0,17	Toluén	1,02 ± 0,60	Metylmetakrylát	4,31 ± 2,00
Pentán	0,70 ± 0,21	m-Xylén	2,53 ± 1,30	Fenol	-0,26 ± 0,76
Cyklopentán	1,15 ± 0,35	Styrén	-0,107 ± 0,500	Benzaldehyd	-0,90 ± 0,29
Nonán	0,36 ± 0,18	1,2,3-trimetylbenzén	3,33 ± 1,25	Metylamín	3,51 ± 1,06
Etén	3,11 ± 1,08	Formaldehyd	2,27 ± 1,40	Metylnitrát	4,49 ± 1,13
Propén	3,85 ± 1,38	Acetaldehyd	2,20 ± 0,72	Jódmetán	-2,30 ± 0,67
<i>trans</i> -But-2-én	4,63 ± 1,93	Metanol	0,26 ± 0,08	Dimetylsulfoxid	2,08 ± 0,81
Buta-1,3-dién	4,07 ± 1,46	Glyoxál	3,15 ± 1,82	2,4-toluéndiizokyanát	-0,64 ± 0,23

Tabuľka 1.3: Prírastkové reaktivity vybraných reaktívnych organických látok (ROL). Údaje boli prevzaté z Carterovej správy (Carter, 2010).

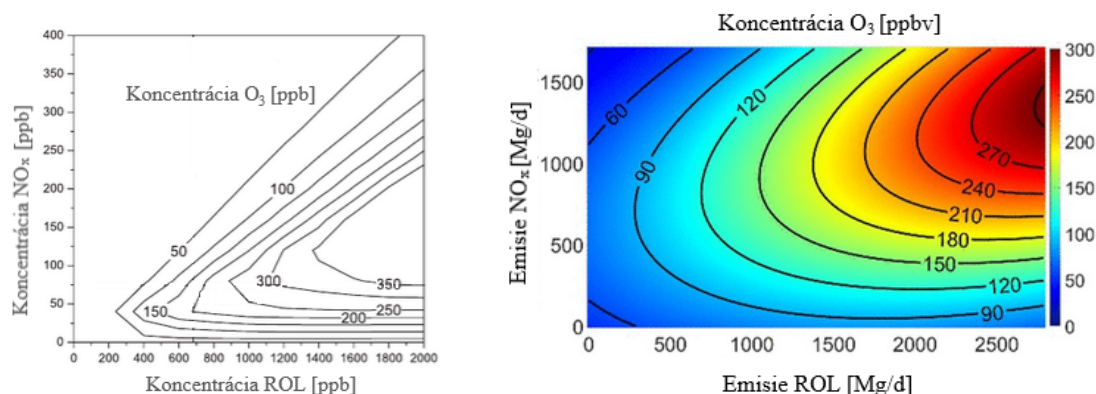
rát a ďalšie, čo je ilustračne ukázané v tab. 1.3. Ako je v nej taktiež poukázané, zápornou hodnotou prírastkovej reaktivity sa vyznačujú napríklad benzaldehyd či jódmetán.

Na základe toho, čo už bolo o chemizme ROL uvedené, je prirodzené predpokladať, že množstvo vznikajúceho O₃ v troposfére z chemického hľadiska závisí ako od samotného zastúpenia jednotlivých ROL, tak od pomeru koncentrácie ROL a NO_x. Z výsledkov numerických simulácií, z laboratórnych experimentov či z ich kombinácie je možné zostrojiť závislosť izopliet maximálnej koncentrácie ozónu vyprodukovaného za istý čas od počiatkovej koncentrácie ROL a NO_x, resp. od veľkosti ich emisií do troposféry, ako je ilustračne zobrazené na obr. 1.6 vľavo, resp. vpravo. Podrobný popis podobných závislostí a ich aplikácií pri riešení možnosti regulácie prízemného O₃ je možné nájsť napríklad v knihe Národnej výskumnej rady (National Research Council (1991)), v ktorej sú uvedené závery, ktoré sú evidentné i z oboch ilustračných obr. 1.6, a to že:

- izoplety maximálnej koncentrácie O₃ majú typicky tvar hrebeňa, pričom maximum koncentrácie O₃ je dosahované pri počiatkovom pomere koncentrácií NO_x a ROL typicky okolo 1:5 až 1:8;
- pri zafixovanej koncentrácii NO_x dochádza s poklesom koncentrácie ROL k poklesu maxima koncentrácie O₃.
- pri zafixovanej koncentrácii ROL dochádza v oblasti vysokej koncentrácie NO_x s jeho poklesom k nárastu maxima koncentrácie O₃, avšak, po prekročení určitej koncentrácie NO_x sa pri jej následnom poklese začne znižovať aj maximum O₃.

V závislostiach izopliet maximálnej produkcie O₃ od počiatkového pomeru koncentrácií ROL a NO_x sú tak zaujímavé tri oblasti, a to:

- tzv. oblasť optimálneho pomeru koncentrácií NO_x a ROL (typicky 1:6 – 1:8), v ktorej je fotochemickou oxidáciou ROL vyprodukovaného za istý čas najviac O₃;
- tzv. NO_x limitujúca oblasť, v ktorej ROL dominujú nad NO_x (pomer koncentrácie NO_x ku ROL je väčší než zhruba 1:8 – 1:10) – jedná sa pritom



Obrázok 1.6: Izoplety maximálnej koncentrácie O_3 v závislosti od počiatkových koncentrácií NO_x a ROL uvedených v ppb (vľavo), resp. od denných emisií NO_x a ROL uvedených v megagramoch za deň, pričom koncentrácia produkovaného O_3 je uvedená v ppbv (vpravo). Obrázok vľavo, resp. vpravo bol prevzatý a upravený z práce: Garciovej a kol. (Garcia a kol., 2013), resp. Qiana a kol. (Qian a kol., 2019).

o typickú situáciu v troposfére prímestských a vidieckych oblastí, kedy dostatočné množstvo HO_2 , RO_2 a $RC(O)O_2$ radikálov premieňa NO na NO_2 (reakciami 1.9, 1.10 a reakciami v schéme na obr. 1.5), pričom jeho fotolýza (t. j. reakcia 1.1) je v tejto oblasti jediným významným zdrojom O_3 (a to reakciou 1.2), a preto je produkcia O_3 limitovaná práve koncentráciou NO_x ;

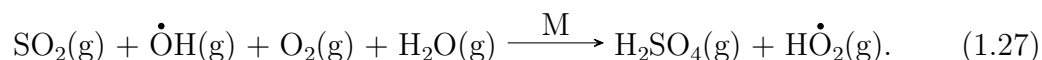
- tzv. ROL limitujúca oblasť, v ktorej je relatívne vysoká koncentrácia NO_x vzhľadom ku koncentrácii ROL (pomer koncentrácií NO_x ku ROL je menší ako asi 1:8 – 1:10) – k tejto situácii dochádza v troposfére niektorých silne znečistených mestských oblastí*, kde zvýšená koncentrácia NO_x zvyšuje rýchlosť reakcie 1.11, na úkor čoho dochádza k zníženiu koncentrácie OH radikálov, ktoré iniciujú práve oxidáciu ROL. Tým sa spomaľuje produkcia HO_2 , RO_2 a $RC(O)O_2$ radikálov, čím klesá produkcia O_3 s rastúcou koncentráciou NO_x . Súčasne, ozón je rýchlejšie odstraňovaný jeho reakciou s NO (teda reakciou 1.3), regeneruje sa pritom fotolýzou NO_2 (t. j. reakciou 1.1), ktorej efektívnosť avšak závisí od intenzity žiarenia.

1.2.3 Chemizmus SO_2

Oxid siričitý je bezfarebný plyn, ktorý je cítiť štiplavým zápachom pri koncentrácii vyššej ako 0,3 ppmv. Jeho hlavnými zdrojmi do troposféry sú: oxidácia dimetylsulfidu ($(CH_3)_2S$), vulkanická činnosť, spalovanie fosílnych palív, procesy pri spracovaní nerastných surovín a chemický priemysel; jeho prepadmi sú: chemické reakcie, rozpúšťanie do oblačných kvapôčiek a do oceánu a prenos do pôdy a ladovcov. Vdychovanie vzduchu s vysokou koncentráciou SO_2 pritom poškodzuje dýchacie cesty a pľúca.

*Napríklad v severoamerických aglomeráciách, mnohých mestách východnej Ázie a v európskych aglomeráciách, ako sú: Atény, Paríž, Miláno či Berlín (Huszar a kol., 2016a).

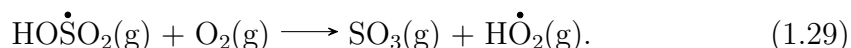
Chemizmu SO_2 v plynnej fáze dominuje jeho oxidácia OH radikálom, pri ktorej vzniká kyselina sírová. Sumárne je túto oxidáciu možné zapísať nasledne:



V prvom kroku oxidácie dochádza po ataku SO_2 hydroxylovým radikálom v prítomnosti „stabilizátora“ ku vzniku radikálu HOSO_2 :



Ten následne reaguje s molekulárnym kysíkom za vzniku oxidu sírového (SO_3) a hydroperoxylového radikálu:



V poslednom kroku reaguje SO_3 s vodnou parou v prítomnosti „stabilizátora“ za vzniku kyseliny sírovej:

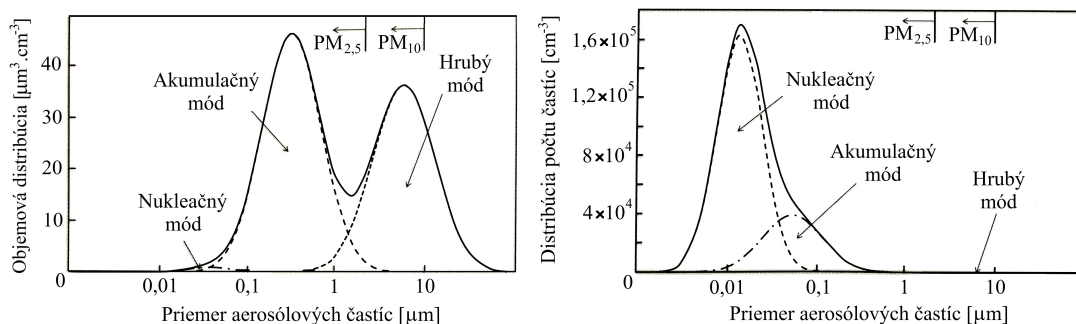


Štúdie zaoberajúce sa oxidáciou plynného SO_2 ukazujú, že veľký význam pri nej zohrávajú taktiež reakcie so stabilizovanými Criegeeho biradikálmi ($\text{R}_2\dot{\text{C}}\text{OO}\dot{\text{O}}$), ktoré vznikajú ozonolýzou ROL s nenasýtenými uhlíkovými väzbami, ako sú: alkény, izoprén a terpény. Napríklad, Boy a kol. (2013) na základe modelových štúdií ukázali, že oxidáciou SO_2 týmito radikálmi môže v oblastiach bohatých na ROL vznikáť 33–46 % z celkovej koncentrácie plynnej kyseliny sírovej v prízemnej vrstve, a to v závislosti od množstva ROL.

Oxid siričitý aj plynná kyselina sírová sú silne rozpustné vo vode, kde sú ešte reaktívnejšie než v plynnej fáze, a tak zohrávajú významnú úlohu v chémii troposféry v kvapalnej fáze a v heterogénnych reakciách, ako je o tom pojednané v nasledujúcej podkapitole.

1.3 Chemizmus aerosólov

Aerosóly (anorganické alebo organické, primárne alebo sekundárne) pôsobia na radiačnú rovnováhu v atmosfére, a to tzv. priamym a nepriamym mechanizmom (Nenes a kol., 1998). Stručne, priamym mechanizmom sa označujú pôsobenie vyvolané absorpciou a rozptylom slnečného a tepelného žiarenia na samotných aerosólových časticiach, nepriamym mechanizmom sa označuje efekt vplyvu zmien distribúcií rôznych druhov aerosólových častíc (ilustračné príklady tvaru objemovej distribúcie a distribúcie počtu aerosólových častíc v závislosti od ich priemeru v typicky znečistenej urbanizovanej oblasti sú zobrazené na obr. 1.7) na vlastnosti interakcie žiarenia s oblačnosťou, keďže práve tie (zmeny distribúcií aerosólových častíc) vyvolávajú zmeny albeda a optickej hrúbky oblačnosti. Ako príklad, Nenes a kol. (1998) uvádzajú, že nárast množstva kondenzačných jadier v oblačnosti vedie ku znižovaniu veľkosti kvapočiek, čo sa prejavuje tak, že oblačnosť sa stáva jasnejšou, a tak odráža viac žiarenia do okolia. V tejto súvislosti je avšak nutné dodať, že mnoho poznatkov o pôsobení oboch mechanizmov na vývoj klimatického systému (štandardne vyjadrovaných pomocou tzv. radiačného



Obrázok 1.7: Ilustračné príklady tvaru objemovej distribúcie (obr. vľavo) a distribúcie počtu aerosólových častíc (obr. vpravo) v závislosti od ich priemeru v typicky znečistenej urbanizovanej oblasti. V obr. sú taktiež zobrazené distribúcie nukleačného, akumulačného a hrubého módu aerosólov. Obrázky boli prevzaté a upravené zo Seigneurovej knihy (Seigneur, 2019).

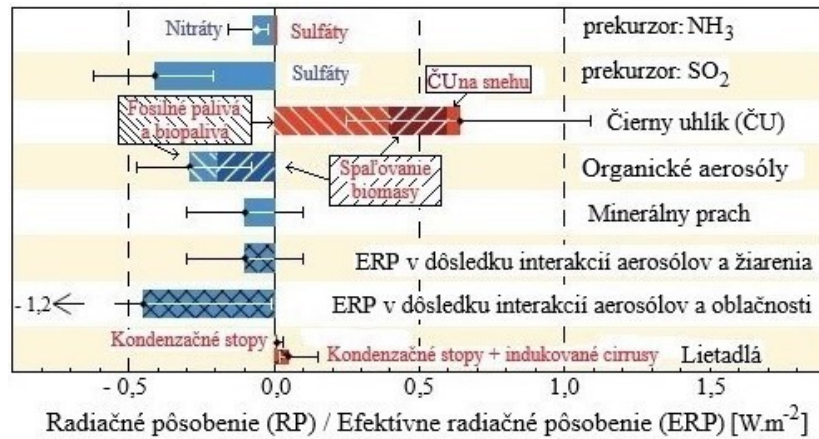
pôsobenia* či efektívneho radiačného pôsobenia) je zatažených veľkou neurčitou, čo je ilustrované na obr. 1.8 a sú tak predmetom intenzívneho štúdia.

Ako je taktiež ilustrované na obr. 1.7, v distribúciach aerosólov je zvykom rozlišovať tri módy, a to: nukleačný, akumulačný a hrubý (Seigneur, 2019), pričom prerozdelenie častíc medzi nimi je riadené: nukleáciou, kondenzáciou (a jej odpovedajúcim opačným procesom – evaporáciou) a koaguláciou.

Nukleácia – tvorba nových častíc aerosólov z molekúl plynov s nízkou hodnotou tlaku nasýtených pár – sa pritom ukazuje byť dôležitým procesom v oblastiach atmosféry, kde sú koncentrácie týchto plynov veľké a súčasne sa v nich nachádza relatívne málo aerosólov (napríklad v blízkosti výfukov spalovacích motorov či v zalesnených oblastiach), pretože v prípade vyšších koncentrácií aerosólov rastie tendencia kondenzácie dominovať nad nukleáciou.

Kondenzácia (resp. evaporácia) – prenos molekúl plynov na existujúce častice (resp. z existujúcich častíc), ku ktorému dochádza v prípade, kedy nie je medzi fázou plynnou a skondenzovanou (kvapalnou či tuhú) dosiahnutá termodynamická rovnováha – je výrazne závislá od priemeru častíc aerosólu, na ktorých k nej dochádza, pričom pri veľmi malých časticách (pri ktorých zohráva dôležitú úlohu ich zakrivenie) sa významne uplatňuje tzv. Kelvinov efekt (t. j. nárast tlaku nasýtenia plynov nad zakriveným povrchom voči povrchu rovnímu), v dôsledku ktorého z aerosólových častíc s priemerom menším, ako je istá kritická hodnota (rozdielna v závislosti od typu plynu pri daných termodynamických podmien-

*Radiačným pôsobením (RP) sa všeobecne označuje zmena v energetickej bilancii klimatického systému, ktorá je v ňom vyvolaná určitou dodatočnou perturbáciou (IPCC, 2013). Ako je však v tejto správe ďalej poznamenané, existuje viacero alternatívnych definícií RP, napríklad na obr. 1.8 sú zobrazené tzv. stratosféricky prispôbené RP, ktoré sú definované, ako zmeny celkového radiačného toku v tropopauze pôsobením perturbácie (v tomto prípade zvýšením koncentrácie aerosólov) potom, čo sa stratosférické teploty znovu nastavujú do radiačnej rovnováhy, a to pri zafixovaní teploty na zemskom povrchu i v troposfére, ako aj ďalších stavových veličín. Efektívnym radiačným pôsobením (ERP) sa označuje zmena celkového nadol smerujúceho toku žiarenia z vrchnej hranice atmosféry, ktorá je vyvolaná interakciami aerosólov ako so žiarením, tak s oblačnosťou (keďže časť týchto interakcií prebieha tak rýchlo, že nie je súčasťou spätnej väzby vznikajúcej v dôsledku zmien povrchovej teploty) potom, čo dôjde k prispôbeniu teplôt v atmosfére, ako aj vodnej pary a oblačnosti, pričom sa buď globálna priemerná povrchová teplota, alebo časť povrchových podmienok nezmenia (IPCC, 2013).



Obrázok 1.8: Ilustrácia radiačného pôsobenia (RP) a efektívneho radiačného pôsobenia (ERP) rôznych druhov aerosólov v období 1750–2011. Na obr. sú okrem príspevkov RP pre jednotlivé druhy aerosólov (v prípade sulfátov rozdelených na základe ich prekursorov; pre aerosóly čierneho uhlíka a organické aerosóly s uvedením zdrojov jednotlivých príspevkov) zobrazené taktiež príspevky ERP vyvolané interakciami aerosólov ako so žiarením, tak s oblačnosťou (vplyv organických sekundárnych aerosólov v nich pritom nebol započítaný) a RP vyvolané aerosólmi produkovanými lietadlami a cirrovitou oblačnosťou nimi indukovanou. Pri každom príspevku, ktorý predstavuje globálny ročný priemer, je vynesená aj veľkosť absolútnej chyby, s ktorou boli určené. Obrázok bol prevzatý a upravený z Piatej hodnotiacej správy Medzivládneho panela pre zmenu klímy (IPCC, 2013).

kách) dochádza k evaporácii plynu do okolia a naopak, na časticiach s priemerom väčším dochádza ku kondenzácii plynu z okolia na častice.

Koagulácia – proces, pri ktorom sa zrážkou dvoch častíc vytvára častica jedna (tento predpoklad je pritom pravdepodobnejší pre častice kvapalné, resp. kvapalinou obalené, ale nemusí vždy platiť v prípade častíc tuhých) – je taktiež silne závislá od priemeru aerosólových častíc, pričom sa ukazuje, že jej rýchlosť je najmenšia pre častice s rovnakou veľkosťou a rastie s rastúcim rozdielom veľkosti aerosólových častíc a taktiež od distribúcie počtu častíc, preto je dôležitejšia najmä pre veľmi malé častice aerosólov (keďže sú väčšinou zastúpené vo väčšom počte ako väčšie častice). Ku koagulácii jemnej frakcie aerosólu dochádza iba v blízkosti zdrojov ich emisií (kde je ich koncentrácia vyššia) a v prípade hrubej frakcie aerosólov je tento proces takmer zanedbateľný.

Podrobnejší popis týchto veľmi dôležitých procesov, ktoré prirodzene musia byť taktiež zabudované do numerických modelov (či už do klimatických, ktoré umožňujú zahrnúť i chemické mechanizmy aerosólových častíc do výpočtu, alebo do chemických transportných), je možné nájsť v knihách Seigneur a Pandisa (Seigneur, 2019; Seinfeld a Pandis, 1998). Na záver tejto state o dynamických procesoch formujúcich, či naopak deštruujúcich aerosólové častice stojí za zmienku to, že tieto procesy sú veľmi komplexné (podmienené mnohými faktormi), čo prirodzene vnáša neistoty pri ich popise samotnom, ako aj pri ich numerickej reprezentácii v modeloch.

Čo sa týka zastúpenia rôznych druhov aerosólov v troposfére, najviac ich je:

anorganických (ako sú sulfáty, nitráty, amónne soli, či morský sprej); minerálneho prachu, najmä teda púštného prachu; ďalej organických a aerosólov označovaných ako čierny uhlík* (IPCC, 2013). Prehľad ich vlastností je pre ilustráciu uvedený v tab. 1.4, resp. 1.5.

Ako je vidieť na obr. 1.8, RF pre väčšinu druhov aerosólov (s výnimkou sulfátov amoniaku, častíc čierneho uhlíka a aerosólov z leteckej dopravy), resp. ERF vyvolané interakciami aerosólov ako so žiarením, tak s oblačnosťou sú záporné (avšak, nutné je prihliadnúť k veľkým neurčitostiam pri ich stanovení), čo znamená, že zmeny koncentrácie týchto častíc v roku 2011 mali v porovnaní s rokom 1750 tendenciu globálnu klímu ochladzovať (naopak, uvedené výnimky mali globálnu tendenciu klímu otepľovať).

1.3.1 Chemizmus anorganických aerosólov

Najzastúpenejšími anorganickými látkami, z ktorých sa tvorí časť sekundárnych anorganických aerosólov sú: kyselina sírova (H_2SO_4), kyselina dusičná (HNO_3) a amoniak (NH_3) (Seigneur, 2019).

Kyselina sírová má pritom veľmi nízku hodnotu tlaku nasýtených pár (na rozdiel od kyseliny dusičnej), a preto nemá tendenciu zotrvať vo fáze plynnej (na rozdiel od HNO_3 , ktorá má naopak tendenciu sa vyskytovať najmä v plynnej fáze). Bežne tak dochádza k nukleácii H_2SO_4 (buď s vodou, alebo s vodou a súčasne s amoniakom) alebo k jej kondenzácii na existujúcich časticách aerosólov. Pretože kyselina sírová je silná kyselina, má vo vodnom roztoku tendenciu (v stave termodynamickej rovnováhy) byť rozštiepená najmä vo forme síranových aniónov, SO_4^{2-} , hydrogensíranových aniónov, HSO_4^- (ktoré bývajú neutralizované plynným amoniakom prítomným v atmosfére) a vodíkových kationov. Plynná kyselina dusičná môže reagovať s amoniakom za vzniku kondenzácie schopného a vo vode rozpustného dusičnanu amónneho (NH_4NO_3), pričom sa ukazuje, že v prí-

*Jedná sa o typ uhlíkatých látok významne absorbujúcich krátkovlnné žiarenie, ktoré vznikajú pri nedokonalom spaľovaní fosilných palív, biopalív. V anglicky písanej literatúre sú označované ako *black carbon*.

Typ aerosólu	Distribučný mód	Hlavné zdroje	Hlavné prepady
Sulfáty	Primárne: nukleačný, akumulčný, hrubý Sekundárne: nukleačný, akumulčný	Primárne: emisie z oceánu, vulkanizmus Sekundárne: oxidácia SO_2 a ďalších biogénnych a antropogénnych plynov obsahujúcich atóm(y) síry	Mokrú depozícia Suchá depozícia
Nitráty	Akumulčný, hrubý	Oxidácia NO_x	Mokrú depozícia Suchá depozícia
Čierny uhlík	Čerstvo emitovaný: $d_p < 100 \text{ nm}$ Starší: akumulčný	Spaľovanie fosilných palív, biopalív a biomasy	Mokrú depozícia Suchá depozícia
Organické aerosóly	Primárne: nukleačný a akumulčný Sekundárne: nukleačný a najmä akumulčný Staršie: akumulčný	Spaľovanie fosilných palív, biopalív a biomasy, ekosystémy, biogénne a antropogénne zdroje	Mokrú depozícia Suchá depozícia
Minerálny prach	Menej akumulčný, najmä hrubý	Veterná erózia, resuspenzia pôdy, poľnohospodárska činnosť, priemyselná činnosť	Sedimentácia Mokrú depozícia Suchá depozícia
Morský sprej	Najmä hrubý, menej akumulčný	Triestenie vzduchových bublín vyvolané napr. vlnením, veterná erózia	Sedimentácia Mokrú depozícia Suchá depozícia

Tabuľka 1.4: Prehľad vlastností najzastúpenejších druhov aerosólov v troposfére. Údaje boli prevzaté z Piatej hodnotiacej správy Medzivládneho panela pre zmenu klímy (IPCC, 2013).

Typ aerosólu	Životnosť v troposfére	Kľúčové vlastnosti pre vývoj klimatického systému
Sulfáty	≈ 1 týždeň	Rozptyl žiarenia; veľká hydroskopičnosť; ak sú deponované na častice čierneho uhlíka, zvyšujú jeho absorbitivitu; aktívne ako kondenzačné jadrá
Nitráty	≈ 1 týždeň	Rozptyl žiarenia; hydroskopičnosť; aktívne ako kondenzačné jadrá
Čierny uhlík	1 týždeň–10 dní	Silná absorbitivita krátkovlnného žiarenia, deponované sú aktívne ako kondenzačné jadrá; môžu byť aktívne ako ľadové jadrá
Organické aerosóly	≈ 1 týždeň	Rozptyl žiarenia; ak sú deponované na častice čierneho uhlíka, zvyšujú jeho absorbitivitu; v závislosti od ich veku a veľkosti môžu byť aktívne ako kondenzačné jadrá
Minerálny prach	1 deň–1 týždeň	Rozptyl a absorbcia žiarenia, aktívne ako ľadové jadrá, skleníkový efekt
Morský sprej	1 deň–1 týždeň	Rozptyl žiarenia; hydroskopičnosť; aktívne ako kondenzačné jadrá; pri menších veľkostiach môžu obsahovať primárne organické polutanty

Tabuľka 1.5: Prehľad vlastností najzastúpenejších druhov aerosólov v troposfére – pokračovanie tab. 1.4. Údaje boli prevzaté z Piatej hodnotiacej správy Medzivládneho panela pre zmenu klímy (IPCC, 2013).

pade, keď je súčin koncentrácií plynnej HNO_3 a plynného NH_3 malý, nedochádza ku vzniku pevného NH_4NO_3 pri nízkej vlhosti vzduchu a aj pri vysokých hodnotách vlhkosti vzduchu dochádza k jeho zanedbateľnej produkcii. Amoniak tak všeobecne neutralizuje hlavne kyselinu sírovú a až v prípade, kedy je v atmosfére prítomné jeho dostatočné množstvo k neutralizácii H_2SO_4 a zároveň dostatočné k tomu, aby bol vyššie zmienený súčin koncentrácií plynnej HNO_3 a NH_3 veľký, môže dochádzať k tvorbe NH_4NO_3 .

V oblastiach maritimných zohrávajú dôležitú úlohu v chemizme anorganických aerosólov ďalšie anorganické zlúčeniny, ktoré sú do troposféry transportované morským sprejom, napr. chlorid sodný (NaCl) či chlór vodík (HCl).

Prirodzene, aby modelovanie aerosólov prinášalo relevantné výsledky, musí byť určitým mechanizmom do modelov chémie anorganických aerosólov začlenená. K tomuto účelu bol pri simuláciách chemizmu v práci použitý mechanizmus ISORROPIA, ktorého stručný popis je uvedený v podkapitole 4.1.2.

1.3.2 Chemizmus organických aerosólov

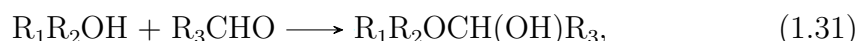
Vo všeobecnosti platí, že substitúciou atómu(ov) vodíka v organickej molekule napr. atómom(ami) kyslíka (ale i ďalšími), resp. jeho(ich) adíciou do nej vzniká organická látka s vyššou molekulovou hmotnosťou, akú mal pôvodný reaktant. Taktiež všeobecne platí, že pre látky s rovnakým počtom atómov uhlíka v ich molekulách klesá hodnotna tlaku nasýtených pár s nárastom ich molekulovej hmotnosti (Seigneur, 2019). To inými slovami znamená, že z organických látok či už substitúciou atómu(ov) vodíka atómom(ami) kyslíka (či iných atómov), alebo ich adíciou do nich sa pri zachovaní dĺžky ich uhlíkového reťazca stávajú látky, ktoré pri nezmennej teplote vzduchu môžu byť schopné kondenzácie, keďže ich prchavosť je menšia ako je tá, ktorú má reaktant, z ktorého vznikli. Takýto proces naväzovania atómov kyslíka či iných atómov okrem vodíka, resp. funkčných skupín (tvorených viacerými atómami) do organických molekúl sa, ako je taktiež uvedené vo vyššie zmienenej knihe, označuje ako funkcionalizácia.

Ako bolo poukázané v podkapitole 1.2.2, viď obr. 1.5, pri fotochemickej oxidácii ROL v plynnej fáze vzniká veľký počet rôznych druhov organických zlúčenín, pričom v jej priebehu je možnosť:

- fragmentácie ROL na látky s molekulovou hmotnosťou menšou, ktoré sa vyznačujú vyššími hodnotami tlaku nasýtených pár, a teda vyššou prchavosťou pri nezmenenej teplote vzduchu;
- funkcionalizácie ROL na látky s molekulovou hmotnosťou väčšou, ktoré sa vyznačujú nižšími hodnotami tlaku nasýtených pár, a teda nižšou prchavosťou pri nezmenenej teplote vzduchu.

Práve druhá z uvedených možností je pritom jedným z kľúčových mechanizmov, ako dochádza k tvorbe sekundárnych organických aerosólov (SOA) v troposfére. Na tomto mieste je však vhodné podotknúť, že problematika funkcionalizácie ROL je stále zatažená značnými neistotami.

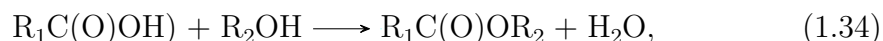
Ako príklady troposférických reakcií, ktoré vedú k vzniku látok s menšou prchavosťou, je možné uviesť (Seigneur, 2019): všeobecnú reakciu alkoholov s aldehydmi, pri ktorej vznikajú hemiacetály:



ďalej všeobecnú reakciu hemiacetálov s alkoholmi, kedy vznikajú acetály a voda:



či kyselín (a to ako anorganických, napríklad H_2SO_4 , tak aj karboxylových) s alkoholmi:



kedy v prvom prípade vznikajú organické soli (v uvedenom prípade sú to organické sulfáty) a voda, v prípade druhom vznikajú estery a voda.

Druhou možnosťou, ako SOA v atmosfére vznikajú, je z emisií ROL s menšou prchavosťou*, z ktorých SOA vznikajú buď ich nukleáciou, alebo ich kondenzáciou na existujúcich aerosólových časticách.

Analogicky k tomu, čo bolo uvedené v prípade anorganických aerosólov, aby modelovanie aerosólov prinášalo relevantné výsledky, musí byť určitým mechanizmom do modelov začlenená i chémia vzniku SOA. K tomuto účelu bol pri simuláciách chemizmu v práci použitý mechanizmus SOAP 2.1, ktorého stručný popis je uvedený v podkapitole 4.1.2.

*V anglicky písanej literatúre sú tieto látky označované ako SVOCs, čo je skratka termínu *semi-volatile organic compounds*. I keď presná definícia SVOCs nie je, často sa nimi označujú ROL, ktorých tlak nasýtených pár je v rozmedzí 10^{-14} – 10^{-4} atm (Seigneur, 2019).

2. Diskusia o počasí v troposfére a jeho vplyve na zmeny koncentrácií polutantov

Asi celkom prirodzené je predpokladať závislosť zmien koncentrácie polutantov od zmien počasia (t. j. od zmien okamžitého stavu troposféry, určeného súborom meteorologických prvkov nad daným miestom zemského povrchu), keďže samotný chemizmus troposféry je od nich závislý (čo bolo poukázané v podkapitolách 1.2 a 1.3). Okrem chemických reakcií samotných sa množstvo danej látky v istom zvolenom objeme, teda jej koncentrácia, môže meniť aj jej prenosom (transportom) cez hranice zvoleného objemu. Meteorologický prvok, ktorý tak logicky prichádza do úvahy v spojitosti so zmenami koncentrácie polutantov v troposfére (všeobecne však v celej atmosfére) je vietor, ktorý nielenže vzduchové častice premiestňuje, ale taktiež sa podiela na ich turbulentnom premiešavaní a je jedným z rozhodujúcich faktorov (presnejšie jeho vertikálny strih) ovplyvňujúcich dynamickú stabilitu atmosféry.

Prúdenie vzduchu v troposfére stredných zemepisných šírok, ktorej časť nad a v okolí Európy je v práci študovaná (obr. 5.1), je na synoptickej mierke ovplyvňované vlnením frontálnych rozhraní medzi vzduchovými hmotami. To deformuje tvar termobarického poľa, čo sa prejavuje napríklad zmenami rozloženia a intenzity tlakových níží a výší*, keďže vzduchové častice majú tendenciu sa premiestňovať z oblastí vyššieho tlaku do oblastí s tlakom nižším, čím dochádza k vyrovnávaniu rozdielov tlaku vzduchu. Existuje tak vzájomná väzba medzi polom prúdenia, ktorú deformuje pole termobarické, pričom jeho deformácie spätne ovplyvňujú pole prúdenia. Poveternostná situácia nad určitým územím je preto vo vyšších hladinách troposféry riadená rozložením a pohybom tlakových útvarov a frontálnych rozhraní v jeho okolí. Prirodzene, v hladinách nižších okrem nich zosilňuje vplyv reliéfu a nehomogenít zemského povrchu na prúdenie vzduchu na menších priestorových mierkach, napríklad v podobe vzniku miestnych cirkulácií, ako sú morské, pevninské či jazerné brízy, svahové, ľadovcové, horské či údolné vetry a i.

Z pohľadu klimatologického sa v poli prízemného tlaku vzduchu vyskytujú tlakové útvary pozorované v priebehu celého roka, tzv. permanentné (kvázipermanentné) akčné centrá atmosféry, resp. v priebehu teplej alebo chladnej sezóny roka, tzv. sezónne akčné centrá atmosféry. Ako príklad je možné uviesť, že vývoj počasia v Európe je v priebehu celého roka ovplyvňovaný azorskou tlakovou výšou a islandskou tlakovou nížou, v chladnej časti roka môže byť ovplyvnený vývojom stredomorskej zimnej tlakovej níže a sibirskej tlakovej výše. Aby nedošlo k mylnej predstave, je vhodné poznamenať, že jednotlivé tlakové útvary vznikajú a zanikajú (teda vyvíjajú sa s časom) a navyše bývajú niekedy viac, inokedy menej presúvané riadiacim prúdením, ktorého smer je výraznou mierou riadený

*Tlaková níž, resp. výš je oblasť s nižším, resp. vyšším tlakom vzduchu voči jeho okoliu, ktorá je na synoptickej mape vyjadrená aspoň jednou uzatvorenou izobarou v poli prízemného tlaku vzduchu redukovaného na hladinu mora, resp. aspoň jednou uzatvorenou absolútnou izohypsou na izobarických plochách v poli absolútnej barickej topografie.

všeobecnou cirkuláciou atmosféry na planetárnej mierke. Ako príklad je vhodné uviesť typický prípad, kedy cyklóna vznikajúca v oblasti Islandu je riadiacim, prevažne západným prúdením pri svojom vývoji presúvaná nad európsky kontinent. Na akčné centrá je teda treba nahliadať ako na oblasti štatisticky najčastejšieho výskytu jednotlivých tlakových útvarov.

Niektoré z charakteristík základných tlakových útvarov, t. j. tlakových níží (cyklón) a tlakových výší (anticyklón) sú uvedené v tab. 2.1. Tie sa na základe ich vertikálneho rozsahu a geografického výskytu zvyknú rozdeľovať na tzv. permanentné (resp. kvázipermanentné) a termické (Jacobson, 2002). Tlakové výše i níže permanentné sú pozorované ako v poli prízemného tlaku vzduchu redukovaného na hladinu mora, tak aj v poli absolútnej barickej topografie v nižších aj vo vyšších izobarických hladinách. Termické cyklóny i anticyklóny sa vyznačujú menším vertikálnym rozsahom a sú pozorované iba v poli prízemného tlaku vzduchu redukovaného na hladinu mora a v poli absolútnej barickej topografie v nižších izobarických hladinách.

Tlakové níže i výše permanentné sa formujú v oblastiach permanentných akčných centier atmosféry, kde môžu zotrvať v priebehu ich celej životnosti, resp. byť riadiacim prúdením z tejto oblasti odsúvané, ako bolo popísané vyššie. Tlakové níže aj výše termické (ako ich pomenovanie naznačuje) sú vyvolané termikou vzduchu v priebehu dňa v určitej sezóne roka na synoptickej, poprípade menších priestorových mierkach. Denný chod horizontálnej mohutnosti aj vertikálneho rozsahu sú typickým rysom týchto útvarov, pričom:

- termické níže sa formujú v teplej polovici roka v kontinentálnych oblastiach, v zimnej polovici roka v oblastiach maritímnych, a to výstupom relatívne teplejšieho vzduchu voči vzduchu okolitému,
- termické výše sú typické v chladnej polovici roka v kontinentálnych oblastiach, kde sú podmienené zápornou radiačnou bilanciou zemského povrchu v nočných hodinách, ktorá môže pretrvať aj v priebehu dňa; ide o oblasti stagnujúceho studeného vzduchu pod vzduchom teplejším.

Z uvedeného vyplýva, že ako termické níže, tak aj výše predstavujú tlakové útvary formujúce sa v oblastiach sezónnych akčných centier atmosféry.

V oblastiach, nad ktorými dominujú tlakové výše (hlavne ich centrálna oblasť) sú meteorologické podmienky vhodné ku zvyšovaniu znečistenia ovzdušia, teda k nárastu celkovej koncentrácie znečisťujúcich látok. Naopak, v oblastiach cez ktoré prechádzajú, resp. na ktorými po istú dobu zotrávajú tlakové níže sú meteorologické podmienky vhodné k redukcii znečistenia ovzdušia. Príčiny vedúce k týmto zovšeobecným konštatovaniam, ktoré sú taktiež uvedené v tab. 2.1, je zčasti možné objasniť pomocou úvah o dynamike prúdenia vzduchu a s ňou spätými termodynamickými procesmi v uvedených tlakových útvaroch. Nutné je avšak podotknúť, že nasledujúce úvahy sú zjednodušené, ich cieľom nie je detailný popis jednotlivých procesov v nich prebiehajúcich, a tak ich treba brať ako formu diskusie typických rysov počasia a jeho dopadov na možnosť šírenia polutantov a ich chemizmu.

Charakteristika	Tlaková níz		Tlaková výš	
	permanentná	termická	permanentná	termická
Rozsah zemepisných šírok	45°–65°	25°–45°	25°–45°	45°–65°
Prízemný horizontálny gradient tlaku	Veľký	Premenlivý	Malý	Premenlivý
Prízemná rýchlosť prúdenia	Veľká	Premenlivá	Malá	Premenlivá
Konvergencia horizontálneho prízemného prúdenia	Konvergencia	Konvergencia	Divergencia	Divergencia
Stáčanie prízemného prúdenia	Cyklonálne	Cyklonálne	Anticyklonálne	Anticyklonálne
Dominujúci smer vertikálneho prúdenia	Vzostupný	Vzostupný	Zostupný	Zostupný
Oblačnosť	Veľká	Malá až veľká	Malá	Malá
Výskyt búrok	Áno	Občas	Nie	Nie
Efekt na znečistenie ovzdušia	Znižovanie	Znižovanie	Zvyšovanie	Zvyšovanie

Tabuľka 2.1: Vybrané charakteristiky základných tlakových útvarov v troposfére. Geografické polohy, teda rozsah zemepisných šírok týchto útvarov je rovnaký pre severnú i južnú hemisféru. Cyklonálne, resp. anticyklonálne stáčanie prúdenia na severnej hemisfére je v smere, resp. v protismere otáčania hodinových ručičiek (na južnej pologuli opačne) pri pohľade na tlakový útvar zhora. Malou oblačnosťou sa myslia stupne pokrytia oblohy oblačnosťou od oblohy jasnej až po polojasnú (t. j. v rozmedzí 0–4 osmín oblohy), oblačnosť veľká zahŕňa stupne pokrytia od polooblačnej až po zamračenú (t. j. v rozsahu 5–8 osmín oblohy). Údaje boli prevzaté a upravené z Jacobsonej knihy (Jacobson, 2002).

2.1 Situácia v oblastiach tlakových výší

V spodných vrstvách tlakových výší prevláda divergencia prúdenia, pričom permanentné výše sú plošne rozsiahlejšie než výše termické. Pôsobením Coriolisovej sily sa vietor pozorovaný v relatívnom súradnicovom systéme korotujúcim so Zemou v nich stáča anticyklonálne, teda na severnej (južnej) pologuli v smere (v protismere) otáčania hodinových ručičiek pri pohľade na anticyklónu zhora. Prízemný horizontálny tlakový gradient býva v anticyklónach permanentných, resp. termických malý, resp. viac premenlivý, preto aj prízemné horizontálne prúdenie (ktoré od neho závisí) v nich býva pomalé (často prevláda vánok až bezvetrie len s občasnými poryvmi vetra), resp. viac premenlivé. Spoločným rysom pri oboch typoch anticyklón je dominujúci pomalý zostup vzduchu vo vertikálnom smere nad zmiešavacou vrstvou, tzv. subsidencia vzduchu. Práve toto zosadenie vzduchu má významný vplyv na vývoj oblačnosti, keďže vzduchové častice hromadne pomaly klesajú do oblasti s vyšším tlakom vzduchu. Okamžité (kváziadiabatické) vyrovanie tlaku okolitého vzduchu s tlakom vo vzduchových časticách spôsobuje ich stláčanie, ktoré je späté s ohrevom ich vzduchu, čo znižuje (vyparováním) množstvo prípadne existujúcej kvapalnej vody či ladových častíc v nich v prospech zvyšovania obsahu vodnej pary. V oblasti centra anticyklóny v teplej polovici roka preto dominuje väčšinou malá alebo žiadna oblačnosť, smerom k jej okrajom sa spravidla viac prejavuje vplyv výstupných pohybov spätých s okolitými tlakovými nížami, resp. do nich zasahujúcich frontálnych rozhraní (frontov), a tak v týchto oblastiach môže existovať oblačnosť viac.

Súčasne, pretože divergenciou prúdenia sa vzduch v spodných hladinách tlakovej výše presúva smerom z centra k jej okrajom, do tejto oblasti subsidenciou vniká vzduch z vyšších hladín troposféry, teda vzduch spravidla sušší a najmä v odľahlých a málo znečistených oblastiach aj bohatší o ozón, keďže jeho priemerná

koncentrácia so vzrastajúcou nadmorskou výškou vzrastá. Subsidiencia vdychu navyše zabraňuje výraznejším vertikálnym výstupom vzduchových častíc podmienených konvekciou a turbulenciou na menších priestorových mierkách v zmiešavacej vrstve, ovplyvňuje teda jej výšku. V anticyklóne je tak typická prítomnosť minimálne jednej zadržujúcej vrstvy, resp. existencia viacerých zmiešavacích a zadržujúcich vrstiev nad sebou.

S ustáleným anticyklonálnym počasím v chladnej polovici roka je v oblastiach s dostatočným množstvom vodnej pary v ovzduší späť častejší výskyt hmiel, resp. nízkej stratovitej oblačnosti. Tie vznikajú jej kondenzáciou, ktorá je podmienená radiačným ochladzovaním vzduchu od zemského povrchu najmä v nočných hodinách. Vývoj nízkej oblačnosti a hmiel je pritom významne ovplyvnený reliéfom zemského povrchu, keďže chladnejší vzduch je hustejší ako vzduch teplejší a má tak tendenciu zatekať do konkávných oblastí (vzhľadom ku atmosfére). Typickými útvarmi formujúcimi sa týmto mechanizmom sú tzv. jazerá studeného vzduchu, viď ČeMS (2019).

Pomalá horizontálna advekcia vzduchových častíc a zamedzovanie ich vertikálneho pohybu sú prirodzené faktory, ktoré môžu prispievať k nárastu celkovej koncentrácie primárnych polutantov v anticyklónoch, najmä teda v ich prízemnej a zmiešavacej vrstve (popr. vo viacerých zmiešavacích vrstvách), keďže práve do MVA sú emitované z prízemných zdrojov. Všeobecne je možné v nich hovoriť o zhoršení ventilačných podmienok, kvalitatívne popísaných nízkymi hodnotami tzv. ventilačného faktora*. Zároveň malá oblačnosť a poloha zdanlivej dráhy Slnka na oblohe v teplej polovici roka zvyšujú pravepodobnosť dlhšieho trvania slnečného svitu a vyššej intenzity žiarenia. V ich dôsledku sa môže zemský povrch v denných hodinách intenzívnejšie zahrievať a prenosom tepla od neho i vzduchové vrstvy, a to hlavne opäť v medznej vrstve. Vyššia intenzita slnečného žiarenia zvyšuje rýchlosť fotolytických reakcií, vyššia teplota vzduchu ovplyvňuje rýchlosť radikálových reakcií, pričom časť z nich sa zrýchli, časť spomalí, viď príklady na obr. 1.4. Zvyšovanie celkovej priemernej koncentrácie primárnych polutantov podliehajúcich fotolýze v denných hodinách obohacuje reakčnú zmes o stále nové radikály, ktoré ju ďalej reakciami propagačnými a terminačnými obohacujú o polutanty sekundárne. Celkovo je teda prirodzené predpokladať zvýšenie celkovej koncentrácie polutantov najmä v nižších vrstvách troposféry, v ktorých je počasie ovplyvňované anticyklónov v teplej časti roka, a to najmä v jej centrálnej oblasti vo fáze zosilňovania. Súčasne, ako však bolo zčasti poukázané v podkapitole 1.2, produkcia sekundárnych polutantov (napr. ozónu) je závislá nie len od meteorologických podmienok, ale aj od pomerov veľkosti emisií primárnych polutantov. Detailné posudzovanie vplyvu meteorologických podmienok na zmeny koncentrácie jednotlivých druhov polutantov preto nie je vôbec triviálne a vyžaduje štúdie založené na numerickom modelovaní.

V súvislosti s počasím späť s pôsobením anticyklóny nad určitým uzemím a s ním súvisiacim zhoršením kvality ovzdušia stoja za zmienku tzv. vlny horúčav*, ktoré sú podmienené práve blokujúcimi anticyklónami v teplej polovici

*Ventilačným faktorom (indexom) sa v tématickej oblasti ochrany čistoty ovzdušia zvyčajne označuje súčin výšky zmiešavacej vrstvy a priemernej rýchlosti vetra v nej nad daným miestom zemského povrchu, viď ČeMS (2019).

*Vlnou horúčav sa označuje obdobie letných horúčav na väčšom území, počas ktorého dosahujú maximálne denné teploty výrazne nadnormálnych hodnôt, pričom u nás sa za praktickú medz považuje teplota 30 °C, viď ČeMS (2019)

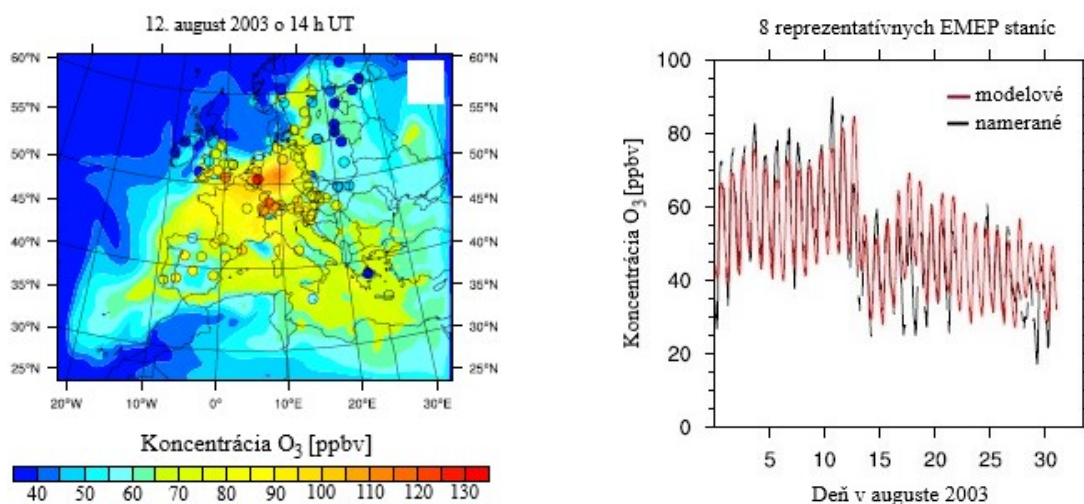
roka. Ako príklad modelovej štúdie takejto epizódy nad Európou je možné zmieniť prácu Shalabyho a kol. (Shalaby a kol., 2012), ktorí modelom RegCM verzie 4 s *online* zabudovaným chemickým mechanizmom CBM-Z (spôsoby prepojenia modelov sú popísané v podkapitole 4.2.1) simulovali časť viac ako 20 dní pretrvávajúcej vlny horúčav, ktorá zasiahla veľkú časť Európy v auguste 2003, viď obr. 2.1 vľavo. Simuláciu realizovali na oblasti pokrývajúcej väčšiu časť Európy, časť severnej Afriky a časť Atlantického oceánu, ako je vidieť na uvedenom obrázku, a to s horizontálnym rozlíšením 60×60 km a na 18 vertikálnych hladinách (kde horná hladina modelu predstavovala izobarickú plochu s tlakom vzduchu 50 hPa) a s časovým krokom integrácie dynamického (hydrostatického) jadra 200 s (nastavenia ďalších parametrov je možné nájsť vo vyššie citovanom článku).

Ako autori uvádzajú, 3. a 4. augusta 2003 začali hodnoty priemernej hodinovej koncentrácie ozónu v MVA prekračovať ich štandardnú hodnotu (90 ppbv) v južnej a v juhozápadnej časti Porúria a v centrálnej oblasti Francúzska. 12. augusta dosahovali tieto koncentrácie veľmi vysokých hodnôt (100–120 ppbv) na väčšine územia Francúzska a západnej Európy (práve táto situácia je ilustračne zobrazená na obr. 2.1 vľavo. Ďalší ilustračný príklad výsledkov uvedených v tejto práci, a to chod priemernej hodinovej koncentrácie O_3 z 8 reprezentatívnych EMEP[†] staníc (ich zoznam je možné nájsť vo vyššie citovanom článku), resp. jemu odpovedajúci chod získaný z prvej modelovej hladiny je zobrazený na obr. 2.1 vpravo. Porovnanie týchto chodov poukazuje na dobrú zhodu zachytenia vývoja koncentrácie prízemného ozónu modelom, pričom, ako je uvedené v článku, stredná systematická chyba priemerných denných miním a maxím koncentrácie O_3 je do 14. augusta menšia ako 5 ppbv, po ňom sú hodnoty denných maxím koncentrácie O_3 modelom nadhodnotené so strednou systematickou chybou 5–10 ppbv.

V chladnej polovici roka je v dôsledku nižšej intenzity slnečného žiarenia (ovplyvnenej opäť polohou zdanlivej dráhy Slnka na oblohe ako aj výskytom hmiel a nízkej stratovitej oblačnosti) rýchlosť fotolytických reakcií menšia, čím dochádza k „celkovému spomalovaniu chemizmu v troposfére“. I napriek tomu, poveternostná situácia v oblastiach s dlhšie pretrvávajúcou výraznou teplotnou inverziou umožňuje, aby celková priemerná koncentrácia polutantov (najmä teda primárnych) v nich mohla dosiahnuť vysoké hodnoty, ba až prekračovať niektoré imisné limity. Typickými oblastami, kde k týmto situáciám dochádza sú napríklad znížené oblasti Českej tabule a Čelnej karpatskej priehlbiny v Českej republike, na Slovensku napríklad v kotlinách Fatransko-tatranskej oblasti a v oblastiach Podunajskej či Východoslovenskej nížiny.

Obdobné počasie tomu v anticyklónach kvázipermanentných je tiež spojené s hrebeňmi vyššieho (vysokého) tlaku vzduchu, preto aj v oblastiach ovplyvňovaných práve nimi je všeobecne možné očakávať zmenšenie ventilácie vzduchu v MVA, ktoré je spojené so zhoršením kvality ovzdušia. Avšak, kvôli spravidla kratšej dobe zotrvania hrebeňov vyššieho (vysokého) tlaku nad daným územím

[†]EMEP je anglická skratka pre *Co-operative Programme for Monitoring and Evaluation of the Long-range Transmission of Air Pollutants in Europe*. Jedná sa o program, ktorého úlohou je na základe dohody *The Convention on Long-range Transboundary Air Pollution* (LRTAP), podpísanej v roku 1979, pravidelne poskytovať vládám a pomocným orgánom vedecké informácie na podporu vývoja a ďalšieho hodnotenia medzinárodných protokolov o znižovaní emisií. Podrobnosti o tomto programe je možné nájsť na internetovej stránke: <https://www.emep.int/index.html>. Dáta zo staníc siete EMEP boli použité aj pri analýze koncentrácií polutantov v diplomovej práci.



Obrázok 2.1: Ilustrácia vplyvu vlny tepla na koncentráciu prízemného ozónu. Na obr. vľavo je zobrazené pole prízemnej koncentrácie O_3 v ppbv získané Shalabym a kol. (Shalaby a kol., 2012) zo simulácie modelom RegCM-CHEM4 pre 12. august 2003 o 14 h UT, pričom N, W, resp. E na mape označujú postupne severnú zemepisnú šírku, západnú, resp. východnú zemepisnú dĺžku. V krúžkoch sú pre identický čas zobrazené priemerné hodinové koncentrácie O_3 namerané na vybraných EMEP stanicách, a to v rovnakej farebnej škále ako sú zobrazené hodnoty modelové. Na obr. vpravo je zobrazený chod priemernej hodinovej koncentrácie O_3 v ppbv získaný z meraní na 8 reprezentatívnych EMEP stanicách a jemu odpovedajúci chod vypočítaný pre tieto stanice z hodnôt modelových. Oba obrázky boli prevzaté a upravené z vyššie uvedenej práce.

v porovnaní s tou, pri kvázipermanentnej anticyklonálnej situácii, nebývajú obvykle dosahované tak vysoké hodnoty celkovej koncentrácie polutantov ako v jej prípade.

2.2 Situácia v oblastiach tlakových níží

Tlakové nízne permanentné vznikajú nárastom amplitúdy vlnenia frontálneho rozhrania v oblastiach permanentných akčných centier troposféry. Jedná sa tak o oblasti, v ktorej dominujúce smery vertikálnych pohybov vzduchových častíc sú riadené dynamikou frontov. Termické tlakové nízne nie sú viazané na frontálne rozhrania, ale ako už bolo zmienené vyššie, sú výsledkom termiky vzduchu na synoptickej, resp. na menších priestorových mierkach. Oba typy níží sú pritom typicky plošne menej mohutné ako kvázistacionárne tlakové výše.

V spodných hladinách oboch typov cyklón prevláda konvergencia prúdenia, pričom výsledkom pôsobenia Coriolisovej sily je v nich prúdenie (pozorované v koroťujúcom systéme súradníc pevne spojených so Zemou) stáčané v cyklonálnom smere, t. j. na severnej (južnej) pologuli v protismere (v smere) otáčania hodinových ručičiek pri pohľade na cyklónu zhora, teda presne opačne než v prípade anticyklón. V cyklónach permanentných, resp. termických môže byť horizontálny tlakový gradient veľký*, resp. viac premenlivý, takže aj prízemné horizontálne

*Veľkosť horizontálneho tlakového gradientu kvázistacionárnej cyklóny závisí od jej vývo-

prúdenie môže byť výrazné (hlavnými faktormi ovplyvňujúcimi jeho rýchlosť sú reliéf zemského povrchu a smer horizontálneho prúdenia), resp. viac premenlivé.

V čele kvázistacionárnych cyklón, resp. na prednej strane ich teplého sektora prevládajú výstupné vertikálne pohyby. Práve nimi sa vzduchové častice dostávajú do oblasti nižšieho hydrostatického tlaku vzduchu, kváziadiabatickým vyrovnávaním tlaku vzduchu v nich s tlakom v okolitom vzduchu dochádza k ich rozpnutiu, ktoré je spojené s poklesom teploty vzduchu v týchto časticiach. Zníženie teploty je späté s posunom rovnováhy mikrofyzikálnych procesov oblačnosti v smere napríklad kondenzácie, tuhnutia, depozície, teda v smere tvorby kondenzátov, a teda aj oblačnosti. Súčasne, latentné teplo uvoľňované pri týchto procesoch spôsobuje ohrev vzduchu vo vzduchových časticiach a môže sčasti ďalej podmieňovať ich výstup do vyšších hladín troposféry, až pokým nedôjde k ustanoveniu termodynamickkej rovnováhy medzi nimi a okolitým vzduchom. Celkovo tak v týchto oblastiach dominuje veľká oblačnosť, často spojená s trvalejším charakterom vypadávania zrážok. Zrážky vypadajúce do teplého vzduchu cyklóny sa pri ich páde odparujú, pričom môžu dopadať až na zemský povrch, avšak, môžu sa aj celkom odpariť. Tak či onak, vzduch sa v tejto oblasti nasycuje vodnou parou, čo môže viesť opäť k tvorbe hmiel.

V tylvej časti kvázistacionárnych cyklón, resp. na zadnej strane ich teplého sektora je počastie ovplyvňované vpádom relatívne chladnejšieho (chladného) vzduchu do vzduchu teplejšieho (teplého). Ide o oblasti, v ktorých je počasie obvykle premenlivé. Prúdenie vzduchu má v dôsledku intenzívnejšieho premiešavania teplejšieho a chladnejšieho vzduchu často charakter silného nárazovitého vetra. V prípade dostatočnej vlhkosti vzduchu je častý výskyt kopovitej oblačnosti s možnosťou vzniku oblakov druhu cumulonimbus (najmä na čele studeného frontu, resp. v blízkosti oklúzneho bodu), ktoré môžu byť sprevádzané búrkovou činnosťou.

V termických tlakových nížach sa výstupnými vertikálnymi pohybmi v závislosti od množstva vlhkosti vo vzduchových časticiach tvorí malá až veľká oblačnosť, v oblastiach intenzívneho výstupu dostatočne vlhkého vzduchu môžu taktiež vznikať oblaky druhu cumulonimbus, avšak v menšej miere ako v cyklónach kvázistacionárnych, či na studených frontoch.

Obvykle vyššia rýchlosť horizontálnej advekcie vzduchových častíc a možnosť ich intenzívnejšieho vertikálneho premiešavania sú faktory prirodzene prispievajúce k poklesu celkovej koncentrácií primárnych polutantov v medznej vrstve cyklón. Všeobecne je tak v nich možné hovoriť o zlepšení ventilačných podmienok, kvalitatívne popísaných vysokými hodnotami ventilačného faktora. Nižšia intenzita slnečného žiarenia podmienená výskytom oblačnosti znižuje rýchlosť fotolytických reakcií, a tým aj produkciu radikálov zúčastňujúcich sa reakcií propagačných a terminačných. Súčasne, v dôsledku výskytu oblačnosti sa zemský povrch zahrieva menej, a teda aj vzduchové vrstvy dosahujú nižších hodnôt teploty, čo taktiež ovplyvňuje rýchlosti radikálových reakcií (pričom však niektoré sú tým urýchlené, iné však spomalené). Vypadávanie zrážok je ďalším faktorom všeobecne znižujúcim koncentráciu látok rozpustných vo vode, ako sú napr. HNO_3 ,

ového štádia, pričom narastá od štádia vzniku po štádium najväčšieho vývoja, kedy dochádza k jej prehlbovaniu. Následne pri jej vyplňovaní postupne klesá. Obdobne, v anticyklónach horizontálny tlakový gradient pri ich zosilňovaní vzrastá, pri ich zoslabovaní klesá, avšak, jeho hodnoty sú spravidla menšie voči hodnotám v cyklónach.

H_2SO_4 či H_2O_2 , a to mokrou depozíciou, ktorá je taktiež dôležitým procesom výmývania aerosólových častíc. Súhrnne je teda logické predpokladať zníženie celkovej koncentrácie polutantov v oblastiach, kde je počasie ovplyvňované cyklónami.

Na záver je vhodné dodať, že všeobecné zlepšenie ventilačných podmienok (vedúce všeobecne k znížovaniu celkovej koncentrácie polutantov nad oblasťami ich emisie) je spojené taktiež s prechodom brázdy nízkeho tlaku vzduchu spojenej či už s teplým, so studeným, alebo s oklúznym frontom nad daným územím.

3. Regionálne klimatické modelovanie a popis RegCM 4.6

Podľa ČeMS (2019) sa klimatickými modelmi všeobecne označujú súbory fyzikálnych a chemických vzťahov, ktoré vo forme matematických rovníc vyjadrujú väzby medzi zložkami klimatického systému resp. veličinami, ktoré ich kvantitatívne popisujú. V priebehu vývoja numerického modelovania klímy, podmieneného:

- vývojom výpočtovej techniky a možnosťami paralelného prepojenia výpočtových jednotiek,
- vývojom numerických metód umožňujúcich riešenie samotných modelov, resp. ich zložiek,
- neustále narastajúcim počtom poznatkov o procesoch prebiehajúcich v klimatickom systéme (získaných z pozorovaní, z laboratórnych experimentov a z výsledkov klimatických modelov) a spôsobmi ich implementácie do čoraz sofistikovanejších modelov,

sa vyvinulo celé spektrum klimatických modelov, od jednoduchých, akými sú napr. energetické bilančné modely klímy či radiačno-konvekčné modely klímy, cez detailnejšie, akými sú dynamické (cirkulačné) modely (GCMs), až po v súčasnosti najdetailnejšie „modely zemského systému“ (ESMs). Ako ESMs sa zvyknú označovať komplexné, prepojené modely[†], ktoré okrem atmosféry, hydrosféry, zemského povrchu a morského ľadu (kryosféry) modelujú aj uhlíkový cyklus, teda zahŕňajú i dynamiku biochemických procesov (Randall a kol., 2018). Tento typ modelov je numerickou reprezentáciou, ktorá sa v podstate najviac približuje k reálnemu klimatickému systému v tom zmysle, že sa v nich paralelne, dynamicky modelujú vyššie uvedené zložky systému spolu s uhlíkovým cyklom pomocou submodelov, pričom väzby medzi nimi sú sprostredkované rozhraniami medzi týmito submodelmi. Dynamickým modelovaním je pritom myslená časová integrácia sústavy riadiacich rovníc, teda evolučných (prognostických) diferenciálnych rovníc, ktoré reprezentujú zákony zachovania hmoty, hybnosti, energie a niektorých meteorologických prvkov (napr. zmiešavacieho pomeru vody, popr. jej jednotlivých fáz či koncentrácie znečisťujúcich prímiesí), ktorá je uzavretá stavovou rovnicou. Ich tvar a počet prirodzene závisí od zložky klimatického systému, pre ktorú sú konštruované, ako aj od aproximácií použitých v samotnom modeli.

Numerické riešenie riadiacich rovníc je v modeloch realizované pomocou mnohých metód, z ktorých sú najviac používané metódy spektrálne a metódy sieti. Primárne sa tieto dve skupiny metód odlišujú spôsobom realizácie diskretizácie priestoru nutnej k samotnému numerickému výpočtu, presnejšie, spôsobom jej realizácie v horizontálnych rovinách, resp. v rovinách konštantnej zovšeobecnenej vertikálnej súradnice a taktiež spôsobom diskretizácie a riešenia samotných riadiacich rovníc. Jeden z variantov diskretizácie priestoru metódou sieti je popísaný

[†]Výraz – prepojený model – je v práci používaný ako voľný preklad anglického termínu *coupled model*.

v podkapitole 3.2.1, keďže práve v RegCM 4.6 je týmto spôsobom realizovaná. Popis realizácie diskretizácie priestoru v spektrálnych modeloch je možné nájsť napr. v Batkovej práci (Batka, 2014).

Procesy prebiehajúce v jednotlivých submodeloch na priestorových škálach menších, ako je priestorové rozlíšenie modelu a na časových škálach menších, než je dĺžka integračného kroku riadiacich rovníc, ako aj všetky interakcie medzi submodelmi sú zahrnuté pomocou parametrizácií. Takýto spôsob zahrnutia „nerozlíšiteľných“ procesov a interakcií do modelu, teda pomocou parametrizácií, je realizovaný vo všetkých typoch klimatických modelov, ako aj v numerických modeloch predpovedi počasia (NWP modeloch). Základný princíp parametrizácií spočíva v tom, že efekty „nerozlíšiteľných“ procesov sú počítané na základe hodnôt meteorologických prvkov prognosticky modelovaných riadiacimi rovnicami, ktoré sú následne zahrnuté ako korekcie polí meteorologických prvkov.

GCMs, AOGCMs* a ESMs riešia výpočet dynamiky klimatického systému na celej Zemi, preto sa radia medzi globálne klimatické modely. Práve táto skutočnosť je prirodzene pokladaná za veľkú výhodu voči modelom regionálnym, ktoré ho realizujú iba na oblasti obmedzenej. Nevýhodami globálnych klimatických modelov voči modelom regionálnym sú napríklad omnoho väčšie finančné náklady potrebné k ich realizácii (spojené s výstavbou superpočítača) a k ich prevádzke z pohľadu ekonomického, z pohľadu fyzikálneho je to ich menšie horizontálne rozlíšenie, ktoré je v súčasnosti pre väčšinu modelov viac než $1^\circ \times 1^\circ$ zemepisnej dĺžky, resp. šírky v atmosfére, v oceáne s rozlíšením podobným ako v atmosfére, resp. s nižším (t. j. horším) (IPCC, 2013).

Vo vyššie uvedenom článku Randalla a kol. (Randall a kol., 2018) je možné nájsť chronologický prehľad viac ako storočného vývoja spätého s modelovaním klimatického systému, za ktorého zrodom stáli myšlienky velikánov meteorológie, ako boli Cleveland Abbe, Vilhelm Bjerknes či Lewis Fry Richardson. Prehľad v súčasnosti používaných AOGCMs a ESMs k hodnoteniu klímy a jej zmien v rámci 5. fázy vzájomného porovnávania prepojených modelov (CMIP5) je možné nájsť v Piatej hodnotiacej správe Medzivládneho panela pre zmenu klímy (IPCC, 2013).

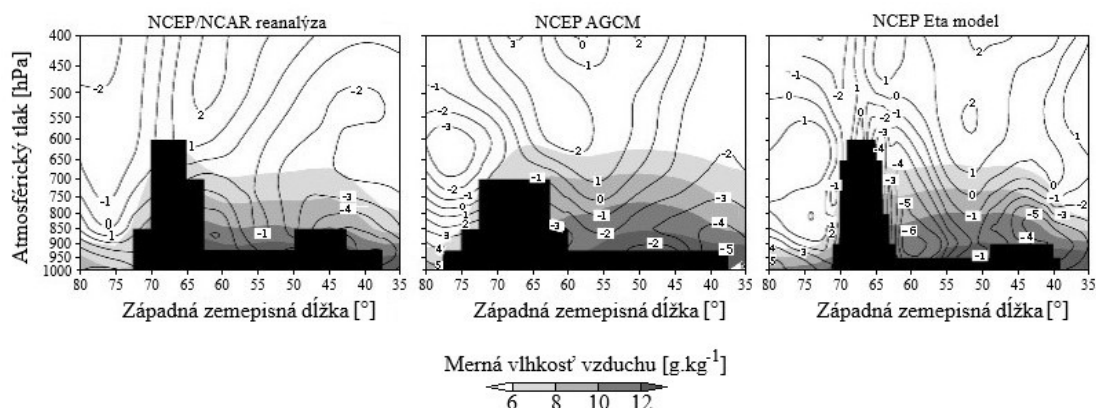
Prvá podkapitola tejto kapitoly je venovaná stručnému úvodu do regionálneho klimatického modelovania. V podkapitole druhej je prehľadne popísaný regionálny klimatický model RegCM 4.6. Pri jej tvorbe boli použité informácie naštudované najmä z referenčného manuálu vytvoreného Elguindiovou a kol. (Elguindi a kol., 2014) a z užívateľského manuálu vytvoreného Giorgim, Solomonom a Giulianim (Giorgi, Solmon a Giuliani, 2016), doplnené o informácie z ďalších, príslušne citovaných zdrojov. V posledných dvoch podkapitolách sú podrobnejšie popísané parametrizácie MVA a konvekcie, ktoré boli v práci pri tvorbe jednotlivých simulácií klímy menené. Pri ich tvorbe boli zdrojmi informácií príslušne citované odborné články.

*Skratka z anglického označenia pre *Atmosphere–Ocean General Circulation Models*. Jedná sa o prepojené klimatické modely, v ktorých je paralelne modelovaná dynamika atmosféry aj oceánu.

3.1 Úvod do regionálneho klimatického modelovania

Nízke priestorové rozlíšenie globálnych klimatických modelov na konci 80., resp. v priebehu 90. rokov minulého storočia (podmienené najmä výkonnosťou výpočtovej techniky) viedlo tímy vedcov ku konštrukcii modelov schopných počítať dynamiku klimatického systému s vyšším priestorovým rozlíšením, avšak na úkor toho, že tieto modely ju simulujú iba na obmedzenej oblasti Zeme. Zvyšovanie priestorového rozlíšenia modelov (t. j. použitie menších rozmerov sieťových buniek) je prirodzene žiaduce z mnohých dôvodov, napr. umožňuje presnejšie zachytiť:

- topografiu zemského povrchu, teda presnejšie zachytiť:
 - georeliéf (tvárnosť povrchu), čo je kľúčové pre spresnenie cirkulácie atmosféry najmä v nižších vrstvách atmosféry, napr. orografia krajiny zohráva v tomto ohľade významný faktor, keďže georeliéf hôr a pohorí predstavuje významné prekážky prúdeniu, ako je ilustračne znázornené na obr. 3.1; orografické prekážky taktiež podmieňujú vznik gravitačných vln, ktoré transportujú energiu a hybnosť do vyšších vrstiev atmosféry, kde dochádza k ich lomu (disipácii);



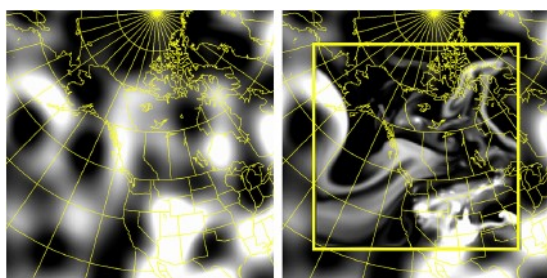
Obrázok 3.1: Ilustrácia spresnenia poľa prúdenia a mernej vlhkosti vzduchu pomocou RCM. Na obrázkoch sú v priereze pozdĺž rovnobežky 20° južnej zemepisnej šírky zobrazené izotachy priemernej meridionálnej rýchlosti prúdenia (kontúry s hodnotami rýchlosti v jednotkách $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) a pole priemernej mernej vlhkosti vzduchu v jednotkách $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (tieňované oblasti) v 9 letných sezónach (december–február, keďže študovaná oblasť je situovaná na južnej pologuli) pokrývajúcich obdobie rokov 1987–2000, ktoré boli určené z NCEP/NCAR reanalýzy (obr. vľavo), z výsledkov simulácie globálnym klimatickým modelom NCEP AGCM s horizontálnym rozlíšením približne $2,4^\circ \times 2,4^\circ$ zemepisnej dĺžky, resp. šírky (obr. uprostred) a z výsledkov simulácií regionálnym klimatickým modelom NCEP Eta s horizontálnym rozlíšením $80 \times 80 \text{ km}$ (obr. vpravo). Na obrázkoch je taktiež vynesená topografia v reanalýze, resp. v použitých modeloch (čierne oblasti). Obrázky boli prevzaté a upravené z de Salesovho a Xueho článku (De Sales a Xue, 2006).

- tvar pobreží oceánov a morí, čo má veľký význam pre spresnenie cirkulácie atmosféry v týchto oblastiach (to je opäť možné vidieť napr. na obr. 3.1 v oblasti zhruba 80°–70°, resp. 40°–35° západnej zemepisnej dĺžky, teda na západ od Ánd, resp. na východ od pobrežia Brazílie);
 - heterogenitu rozloženia rôznych typov obnaženej vrchnej časti litosféry, pôdnych a vegetačných typov, vodných systémov, zasnežených oblastí, ľadovcov a urbanizovaných oblastí v určitej oblasti vyjadrenú mnohými parametrami (napr. albedom, tepelnou vodivosťou a kapacitou, parametrom drsnosti a i.), keďže práve od nich je závislá väčšina príspevkov jednotlivých členov teplej bilancie zemského povrchu* v určitej oblasti, čo je kľúčové pre spresnenie transportu hybnosti, tepla, žiarenia, vodnej pary a taktiež polutantov medzi povrchom Zeme a MVA;
- cirkuláciu atmosféry, napr.:
 - presnejšie simulovať polohu a tvar tlakových útvarov a frontov, čo sa prirodzene odzrkadluje i na spresnení polí meteorologických prvkov, napríklad oblačnosti, ako je ilustrované na obr. 3.2;
 - dynamiku tryskového prúdenia, čo je ilustrované na obr. 3.1, kde v poli priemerného meridionálneho prúdenia získaného zo simulácií regionálnym klimatickým modelom (obr. vpravo) je vidieť štruktúru nízko hladinového letného tryskového prúdenia situovaného východne od Ánd (jadro prúdenia sa nachádza zhruba na 60° západnej zemepisnej dĺžky na tlakovej hladine 900 hPa), ktorá pri simulácii pomocou globálneho modelu nie je vôbec evidentná (obr. uprostred);
 - pri dostatočne vysokom horizontálnom rozlíšení, rovnom alebo vyššom než 4×4 km, explicitne simulovať cirkuláciu spojenú s vertikálne mohutnou konvekciou (Xue a kol., 2014; Wagner a kol., 2018), t. j. bez použitia parametrizácií konvekcie, čo sa musí opäť premietnuť do zmien simulovaných polí meteorologických prvkov, napríklad zrážok najmä z konvektívnej oblačnosti, ktoré sa prejavujú v celkovom zrážkovom úhrne, ako je ilustračne zobrazené na zmenách ročného úhrnu zrážok získaných zo simulácií modelom WRF pri zvyšovaní horizontálneho rozlíšenia ako v rovinatej, tak v hornatej oblasti Nemecka, vid' obr. 3.3;
 - heterogenitu svetového oceánu spätú ako s povrchovou, tak aj s hlbinnou (termohalinnou) cirkuláciou.

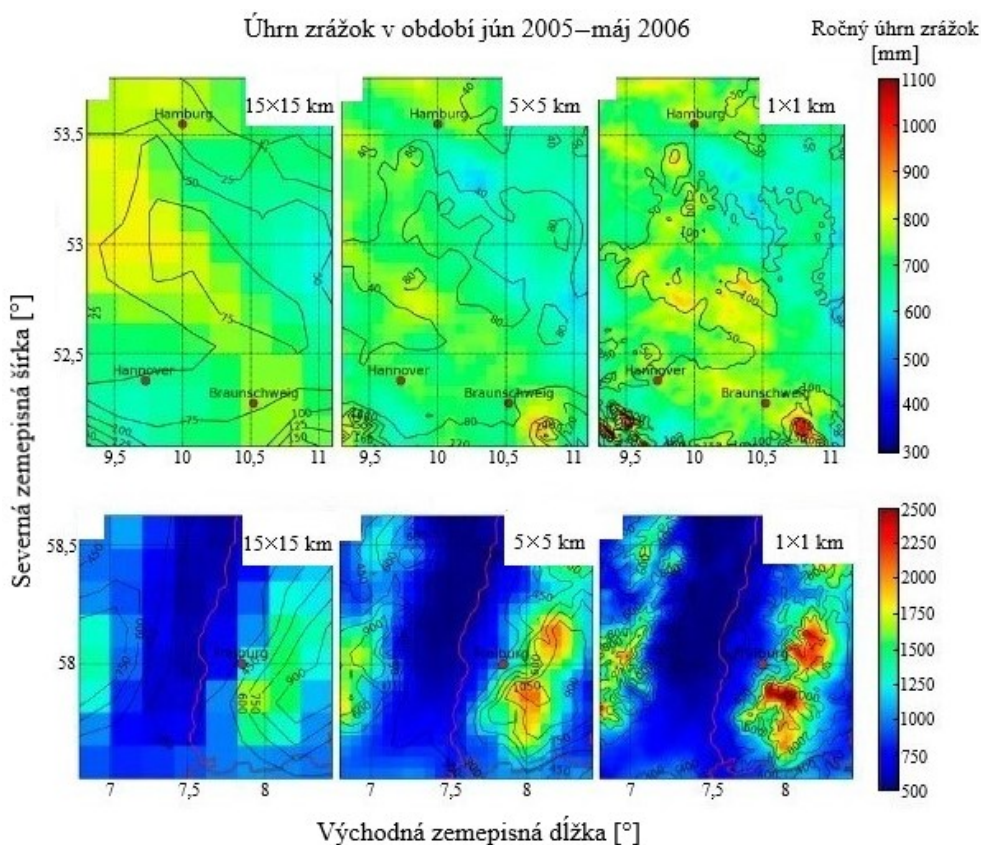
*Rovnica teplej bilancie zemského povrchu je bilančnou rovnicou ziskov a strát tepla na zemskom povrchu, ktorý sa obvykle pokladá za plochu s nulovou tepelnou kapacitou. Je ju možné vyjadriť napr. rovnicou:

$$R + P + V + S = 0,$$

kde: R je súčet radiačnej bilancie zemského povrchu, P je množstvo tepla odvádzaného zo zemského povrchu do atmosféry, resp. privádzaného z atmosféry na zemský povrch turbulентnou výmenou, V je teplo spotrebované na výpar alebo uvoľňované pri tvorbe kondenzačných produktov na zemskom povrchu a S je teplo odvádzané do pôdy alebo privádzané z hlbších pôdnych vrstiev k zemskému povrchu. V prípade, že na zemskom povrchu existujú nezanedbateľné tepelné kapacity (napr. budovy v zastavaných oblastiach), je možné ich vplyv zahrnúť do členu S a rovnicu teplej bilancie povrchu tak zachovať v uvedenom tvare, vid' ČeMS (2019).



Obrázok 3.2: Porovnanie okamžitého poľa oblačnosti simulovaného pomocou GCM, presnejšie modelom CGCM2 s horizontálnym rozlíšením siete 450×450 km (obr. vľavo) a pomocou RCM, presnejšie modelom CRCM s horizontálnym rozlíšením siete 45×45 km (obr. vpravo, kde simulovaná oblasť je naznačená žltým štvorcikom). Obrázky boli prevzaté z Lapriseho článku (Laprise, 2008).

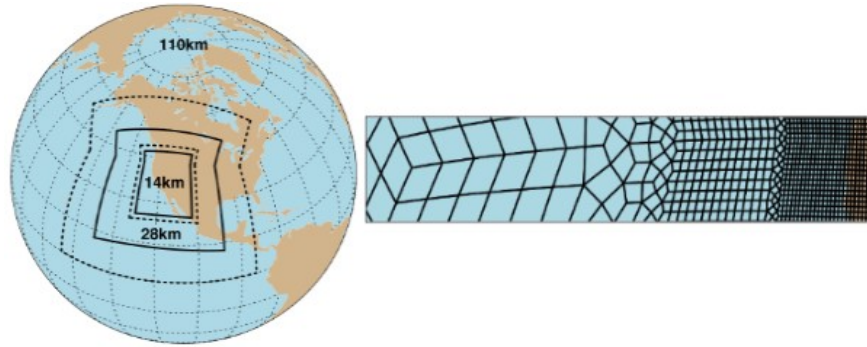


Obrázok 3.3: Ilustrácia zmien poľa ročného úhrnu zrážok simulovaného RCM so zvyšujúcim sa horizontálnym rozlíšením. Na obrázkoch sú zobrazené polia ročného úhrnu zrážok v milimetroch v období jún 2005–máj 2006 vytvorené zo simulácií modelom WRF v rovinatej oblasti severného Nemecka, presnejšie v okolí mesta Hamburg (vrchné 3 obrázky) a v hornatej oblasti juhozápadného Nemecka, presnejšie v okolí mesta Freiburg (spodné 3 obrázky) s horizontálnym rozlíšením 15×15 km (obr. vľavo), 5×5 km (obr. uprostred) a 1×1 km (obr. vpravo). V obrázkoch sú taktiež vynesené izohypsy (vrstevnice) zemského povrchu s hodnotami nadmorskej výšky v metroch nad morom. Obrázky boli prevzaté a upravené z článku Wagnera a kol. (Wagner a kol., 2018).

Jednou z techník simulácie klímy s vyšším rozlíšením (v súčasnosti všeobecne označovaných ako dynamický downscaling) bolo a veľmi populárnym dodnes zostáva použitie regionálnych klimatických modelov (RCMs). Základná myšlienka, na ktorej sú principiálne vybudované tieto modely, je jednosmerné vnorenie modelu s vyšším priestorovým rozlíšením (teda RCM) do modelu s rozlíšením nižším (teda do GCM). Prakticky sa jedná o použitie výstupov polí meteorologických prvkov z GCMs, resp. niektorej z reanalýz ako počiatočnej a okrajových podmienok nutných k simulácii pomocou RCM. Tá je opäť realizovaná numerickou integráciou riadiacich rovníc, avšak v tomto prípade na obmedzenej oblasti. Časové pokrytie reanalýzy, resp. globálneho modelu logicky preto musí byť minimálne také, aké je požadované časové pokrytie simulácie RCM. Okrajové podmienky je nutné počas integrácie RCM meniť s istým časovým krokom, čo je nevyhnutné k tomu, aby simulácia s vyšším priestorovým rozlíšením reagovala na pôsobenie (forcing) meteorologických prvkov vyvolané veľkoškálovou cirkuláciou atmosféry a oceánu vo zvyšku klimatického systému, ktorý v nej nie je simulovaný. Jednosmerným vnorením sa myslí tá skutočnosť, že zmeny polí meteorologických prvkov generované RCM neovplyvňujú polia meteorologických prvkov generované GCM (o spôsoboch prepojenia modelov je podrobnejšie pojednané v podkapitole 4.2.1).

Ďalším spôsobom realizácie dynamického downscalingu je pomocou GCMs prispôbených tak, že učitú oblasť klimatického systému (spravidla ide o oblasť geografickú) počas jeho behu integrujú s vyšším rozlíšením, napr. ako je ilustračne znázornené na obr. 3.4 (vpravo). Takto prispôbené GCMs sa označujú ako „dynamické (cirkulačné) modely s premenlivým rozlíšením“ (VRGCMs). Laprise (2008) uvádza, že výhodou VRGCMs voči RCMs je fakt, že sa vyhýbajú potenciálnemu nedostatku koherencie medzi GCM a RCM spôsobenej ich rozdielnou formuláciou a súčasne skutočnosť, že umožňujú prirodzenú obojsmernú interakciu medzi študovanou oblasťou záujmu a zvyškom klimatického systému na celej Zemi; nevýhodou je prirodzene vyššia výpočtová náročnosť, keďže sa jedná o globálne modely.

Dynamickým downscalingom (DD), ako uvádza Laprise (2008), sa označuje: „*Všeobecne uznávaná schopnosť vnorených modelov s jemnejším rozlíšením (vybavených vhodnými parametrizáciami subgridových fyzikálnych procesov a rozhodujúcich fyzioğrafických detailov a riadených na ich hraniciach časovo závislými veľkoškálovými atmosférickými dátami) generovať meteorologicky koherentné štruktúry na priestorovo menších škálach.*“ Súčasne, ako ďalej píše: „*Pre najväčšie rozlíšiteľné škály v obmedzenej oblasti RCM je malý dôvod očakávať modifikáciu cirkulácie voľnej atmosféry (použitej ako počiatočnú a okrajové podmienky) vyvolanú RCM; a pokiaľ by tomu tak bolo, viedlo by to k nezrovnalostiam, ktoré by mohli mať za následok veľké obtiaže s počiatočnými a okrajovými podmienkami.*“ Inými slovami povedané, RCM by v princípe nemal narušovať cirkuláciu voľnej atmosféry v obmedzenej oblasti, kde dochádza k jeho behu, keďže tá je (ako už bolo uvedené) riadená najmä cirkuláciou atmosféry na veľkých priestorových mierkach (t. j. na miekre planetárnej a synoptickej). Teda po priestoročasovom spriemerovaní polí meteorologických prvkov získaných z RCM na polia s rozlíšením, aké majú polia použité k tvorbe počiatočnej a okrajových podmienok a ich následným porovnaním s časovo spriemerovanými poliami použitými k tvorbe počiatočnej a okrajových podmienok by medzi nimi nemali existovať výrazné rozdiely vo vyšších vrstvách troposféry (teda presnejšie vo voľnej atmosfére).



Obrázok 3.4: Ilustrácia horizontálnej štruktúry siete vo VRGCM. Na obr. vľavo sú znázornené oblasti integrácie s rôznym horizontálnym rozlíšením v modeli VR-CESM použité v práci Huangovej a kol. (Huang a kol., 2016). Globálna simulácia prebiehala s horizontálnym rozlíšením 1° zemepisnej šírky, resp. dĺžky (čo odpovedá rozlíšeniu v priemere asi 110×110 km), simulácie vo vyznačených oblastiach s horizontálnym rozlíšením $0,25^\circ$, resp. $0,125^\circ$ zemepisnej šírky, resp. dĺžky (čo odpovedá rozlíšeniu v priemere asi 28×28 km, resp. 14×14 km). Prerušovanými čiarami sú naznačené oblasti, kde dochádza ku zjemneniu rozlíšenia siete. Na obr. vpravo je v detaile znázornená štruktúra siete v horizontálnej rovine s obidvomi oblasťami zjemnenia siete. Obrázky boli prevzaté z vyššie citovaného článku.

Väčšina RCMs (vrátane modelu RegCM) bola vyvíjaných z mezoškálových modelov predpovedi počasia na obmedzenej oblasti (LAMs) prispôbením dynamického jadra a parametrizácií k simuláciám s väčším priestorovým rozlíšením tak, aby počas simulácie boli zachované zákony zachovania energie, hybnosti, hmotnosti, ale aj bilancia vody, popri prípade ďalších chemických látok (napríklad ozónu), čo je prirodzene nutné k tomu, aby RCMs verne zachytávali tieto dôležité črty klimatického systému (Randall a kol., 2018). Zaujímavosťou z historického hľadiska je, že práve model RegCM, teda jeho 1. generácia vyvinutá v Národnom centre pre výskum atmosféry (NCAR) na konci 80. rokov minulého storočia, bol vôbec prvým modelom použitým k dlhodobým simuláciám regionálnej klímy (Elguindi a kol., 2014). RegCM je v súčasnosti neustále zdokonalovaný skupinou vedcov koordinovaných Sekciou fyziky zemského systému v Abdus Salamovom medzinárodnom centre teoretickej fyziky (ICTP) sídliacom v talianskom Terste.

Samotný spôsob realizácie DD pomocou RCMs tak, aby prinášal relevantné výsledky pri štatistickom porovnaní simulovaných polí klimatických prvkov s rôznymi druhmi meraní, nie je vôbec jednoduchý, ako by sa na prvý dojem mohlo zdať a dodnes predstavuje oblasť intenzívneho záujmu širokej komunity vedcov. Tento fakt je dôsledkom veľkého počtu faktorov, ktoré samotnú schopnosť DD pri simuláciách RCMs ovplyvňujú. Rozbor problematiky späté s vplyvom rôznych faktorov na kvalitu DD pomocou RCMs je možné nájsť napr. v prehľadovom článku Xueho a kol. (Xue a kol., 2014), ktorí medzi nimi zmienili napr.:

- vlastnosti oblasti, na ktorej je simulácia realizovaná, presnejšie jej:
 - veľkosť a geografickú polohu, ktoré významne ovplyvňujú schopnosť DD pre zrážky a ďalšie meteorologické prvky, pričom sa ukazuje, že:
 - * so zväčšovaním plochy oblasti narastá taktiež vnútorná variabilita modelov (vedúca k zvyšovaniu pravdepodobnosti ich odbočenia

od klimatológie danej okrajovými podmienkami), čo sa prejavuje nízkou kvalitou DD;

- * so zmenšovaním plochy oblasti môže vzrástať vplyv okrajových podmienok na cirkuláciu v nej natoľko, že model prestáva byť schopný dostatočne modulovať veľkoškálové štruktúry cirkulácie (pochádzajúce z okrajových podmienok) a prostredníctvom interakcií produkovať adekvátne štruktúry na menších škálach, čo sa opäť prejaví nízkou kvalitou DD;
 - * pre zvýšenie kvality DD by sa pri voľbe geografickej polohy napr. nemali klásť jej okraje do oblastí pohorí, resp. do oblastí s veľkou neurčitostou okrajových podmienok;
- rozlíšenie, pri ktorom je prirodzené očakávať, že s jeho zvyšovaním by mala kvalita DD narastať, čo však môže byť zavádzajúce v tom zmysle, že zlepšenie DD pri vyššom rozlíšení, napr. pri porovnaní polí klimatických prvkov zo simulácie z RCM s tými z GCM nie je spôsobené ním samotným, ale použitím presnejšieho popisu dynamiky a parametrizácií subgridových procesov v RCM voči GCM;
- okrajivé podmienky použité k simulácii, presnejšie:
 - ich kvalitu, čo je logické, keďže korigujú priebeh numerického výpočtu modelu pôsobením meteorologických prvkov na okrajoch študovanej oblasti, pričom vo všeobecnosti sa ukazuje, že reanalýzy meteorologických prvkov sú k tomuto účelu vhodnejšie než samotné výstupy meteorologických prvkov z globálnych modelov, pokiaľ teda existujú pre časový rozsah simulácie (čo je celkom prirodzené očakávanie, keďže polia meteorologických prvkov reanalýzy sú vytvorené metódami objektívnej analýzy, a tak predstavujú „ideálne“ počiatočné a okrajové podmienky pre RCMs), pričom sa ukazuje, že nie je možné jednoznačne vyhodnotiť, ktorá z existujúcich reanalýz je univerzálne „najlepšia“ (kvalita DD behov RCM pri použití rôznych reanalýz závisí napr. od geografickej polohy študovanej oblasti, či od ročných období);
 - spôsob ich naviazania na RCMs, ktorý je v závislosti od vnútornej štruktúry samotného RCM riešený viacerými spôsobmi, napr. v mnohých RCMs používajúcich rôzne varianty metódy sietí (napokon i v modeli RegCM 4.6) pomocou relaxačno-difúznej techniky*
 - časový interval ich obmeny, kde sa ukazuje, že pokiaľ majú okrajové podmienky dobrú kvalitu, zmenšovanie intervalu ich obmeny počas integrácie modelu by malo napomáhať k zlepšeniu kvality DD, i keď použitie príliš krátkeho interval môže naopak kvalitu DD zhoršiť;

*Relaxačno-difúzna technika je spôsob napojenia okrajových podmienok, kedy sa v tzv. „puferovej oblasti“ (tvorenej niekoľkými riadkami, resp. stĺpcami bodov siete od okrajov oblasti) počas časovej integrácie hodnoty prognostických premenných určené modelom korigujú relaxačným členom, ktorý ich „postrkáva“ k hodnotám okrajových podmienok a členom difúznym, ktorý „vyhladzuje“ rozdiely medzi hodnotami modelovými a tými, danými okrajovými podmienkami (Giorgi a kol., 2016). V anglickej písanej literatúre sa puferová oblasť, resp. vyššie popísané postrkávanie označujú ako *buffer zone*, resp. *nudging*.

- parametrizácie fyzikálnych procesov použité pri simuláciách, pričom na základe mnohých štúdií sa ukazujú parametrizácie konvektívnej oblačnosti (ďalej v práci označované len ako parametrizácie konvekcie), spolu s vegetačnými a pôdnymi procesmi parametrizovanými v modeloch zemského povrchu ako rozhodujúce pri zvyšovaní kvality DD.

3.2 Komponenty RegCM 4.6

Modelový systém RegCM 4.6 sa skladá z programov (komponetov), ktoré je možné rozdeliť do troch skupín, a to na programy:

- slúžiace k príprave vstupných dát, t. j. k tvorbe:
 - oblasti, na ktorej sa simulácie realizujú,
 - počiatkových a okrajových podmienok;
- riadiace samotnú simuláciu:
 - dynamické jadrá,
 - submodely (moduly) jednotlivých parametrizácií;
- slúžiace k spracovaniu modelových výstupov.

Nastavenie vstupných parametrov simulácie je možné pomocou konfiguračného súboru, ktorý je taktiež súčasťou modelu. Jeho podrobný popis, spolu s popisom:

- prípravy potrebných vstupných dát do simulácie,
- realizácie samotného behu modelu,
- niektorých z programov slúžiacich ku spracovaniu výstupov modelu

je možné nájsť v užívateľskom manuáli Giorgiho a kol. (Giorgi a kol., 2016).

3.2.1 Hydrostatické dynamické jadro a diskretizácia siete modelu

Dynamickým jadrom klimatických modelov (resp. NWP modelov a LAMs) sa označuje sústava riadicich rovníc. V RegCM 4.6 je zabudované hydrostatické i nehydrostatické dynamické jadro, pričom obe (aj s ich priestorovou diskretizáciou) vychádzajú z dynamických jadier použitých v modeli MM5 (Grell, Dudhia a Stauffer, 1994). Rozdiely medzi nimi spočívajú v použití rozdielnych aproximácií riadiacich rovníc, ako aj v spôsobe ich priestorovej diskretizácie. Pretože v diplomovej práci boli simulácie regionálnej klímy realizované iba pomocou hydrostatického dynamického jadra, ďalší popis je venovaný len jemu, spôsobu diskretizácie siete pri jeho použití a numerickej metóde, ktorou je riešené.

Z hľadiska dynamiky atmosféry je pri konštrukcii riadiacich rovníc hydrostatického jadra kľúčovým predpoklad nepretržitej platnosti hydrostatickej rovnováhy vo vertikálnom smere, t. j. že sila tlakového gradientu v tomto smere je presne kompenzovaná gravitačnou silou. V dôsledku toho sa pohybová rovnica

(rovnica zákona zachovania hybnosti) vo vertikálnom smere redukuje na rovnicu hydrostatickej rovnováhy (rovnica 3.5). Na túto aproximáciu možno nahliadať tak, že atmosféra pri svojom pohybe príliš nejaví tendenciu sa rozpínať vo vertikálnom smere (Bařka, 2014). Pechala a Bednář (1991) uvádzajú, že na základe rádových odhadov bežne pozorovaných horizontálnych a vertikálnych pohybov v atmosfére býva predpoklad hydrostatickej rovnováhy vo vertikálnom smere, až na oblasti vyznačujúce sa výraznými pohybmi v tomto smere (napr. v búrkových oblakoch), splnený s presnosťou zbruba na 0,1 %. I napriek tomu, je vhodné upozorniť na fakt, že tento predpoklad v modeli úplne vylučuje konvekciu (vyvolávanú práve rozdielom vyššie zmienených síl), ako možný mechanizmus odstraňovania statických instabilit, a preto ju je nutné zahrnúť do výpočtu pomocou parametrizácie konvekcie (o typoch tejto parametrizácie je bližšie pojednané v podkapitole 3.4).

Hydrostatické dynamické jadro sa skladá zo sústavy rovníc, ktorú je možné nájsť v prácach Elguindiovej a kol. (Elguindi a kol., 2014), resp. Grella a kol. (Grell a kol., 1994):

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^* u}{\partial t} = & -m^2 \left(\frac{\partial p^* uu/m}{\partial x} + \frac{\partial p^* vu/m}{\partial y} \right) - \frac{\partial p^* u \dot{\sigma}}{\partial \sigma} - \\ & - mp^* u \left(\frac{RT_V}{p^* + p_t/\sigma} \frac{\partial p^*}{\partial x} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + p^* f v + D_u, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^* v}{\partial t} = & -m^2 \left(\frac{\partial p^* uv/m}{\partial x} + \frac{\partial p^* vv/m}{\partial y} \right) - \frac{\partial p^* v \dot{\sigma}}{\partial \sigma} - \\ & - mp^* v \left(\frac{RT_V}{p^* + p_t/\sigma} \frac{\partial p^*}{\partial y} + \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) - p^* f u + D_v, \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial p^*}{\partial t} = -m^2 \left(\frac{\partial p^* u/m}{\partial x} + \frac{\partial p^* v/m}{\partial y} \right) - \frac{\partial p^* \dot{\sigma}}{\partial \sigma}, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^* T}{\partial t} = & -m^2 \left(\frac{\partial p^* uT/m}{\partial x} + \frac{\partial p^* vT/m}{\partial y} \right) - \frac{\partial p^* T \dot{\sigma}}{\partial \sigma} + \\ & + \frac{RT_V}{c_p(\sigma + p_t/p^*)} \left\{ p^* \dot{\sigma} + \sigma \left[\frac{\partial p^*}{\partial t} + m \left(u \frac{\partial p^*}{\partial x} + v \frac{\partial p^*}{\partial y} \right) \right] \right\} + \\ & + \frac{p^* Q}{c_p} + D_T, \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \ln(\sigma + p_t/p^*)} = -RT_V \left[1 + \frac{q_c + q_r}{1 + q_v} \right]^{-1}, \quad (3.5)$$

v ktorých je: u , resp. v – meridionálna, resp. zonálna zložka horizontálnej rýchlosti prúdenia; p^* – rozdiel tlakov vzduchu, definovaný rovnicou 3.11; m – koeficient

skreslenia konformnej mapy, definovaný rovnicou 3.9; Φ – geopenciálna výška; $\dot{\sigma}$ – zovšeobecnená vertikálna rýchlosť prúdenia v σ - p systéme, definovaná rovnicou 3.7; σ – zovšeobecnená vertikálna súradnica v σ - p systéme, definovaná rovnicou 3.10; R – merná plynová konštanta suchého vzduchu; T_V – virtuálna teplota, definovaná rovnicou 3.8; f – Coriolisov parameter; $\partial/\partial t$, $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, $\partial/\partial \sigma$ – operátory parciálnej derivácie podľa času t a súradníc x , y a σ ; T – termodynamická teplota; c_p – merné teplo vlhkého vzduchu pri konštantnom tlaku; Q – diabatický ohrev; q_v – zmiešavací pomer vodnej pary; q_c , resp. q_r – zmiešavací pomer kondenzátov vody (či už v kvapalnej alebo v pevnej fáze) v oblačnosti, resp. v zrážkách; $\partial/\partial \ln(\sigma + p_t/p^*)$ je operátor parciálnej derivácie podľa $\ln(\sigma + p_t/p^*)$, kde: p_t je tlak vzduchu zvolený na hornej hranici modelu, viď obr. 3.5 (vpravo); D_u , resp. D_v popisujú efekty horizontálnej a vertikálnej difúzie v smere rýchlostí prúdenia u , resp. v a D_T popisuje efekty horizontálnej a vertikálnej difúzie a vertikálneho premiešavania vzduchu.

Rovnica 3.1, resp. 3.2 predstavuje pohybovú rovnicu (t. j. rovnicu zachovania hybnosti) v horizontálnej rovine v západnom, resp. v južnom smere (na obr. 3.5 (vľavo) v smere osi j , resp. i). Rovnica 3.3 reprezentuje zákon zachovania hmotnosti (t. j. rovnicu kontinuity). Jej integráciou pozdĺž zovšeobecnej vertikálnej súradnice, σ , v celom stĺpci atmosféry je v modeli daná prognostická rovnica pre tendenciu prízemného tlaku:

$$\frac{\partial p^*}{\partial t} = -m^2 \int_0^1 \left(\frac{\partial p^* u/m}{\partial x} + \frac{\partial p^* v/m}{\partial y} \right) d\sigma. \quad (3.6)$$

Postupná vertikálna integrácia rovnice 3.3 od povrchu so zahnutím tendencie prízemného tlaku:

$$\dot{\sigma} = -\frac{1}{p^*} \int_0^\sigma \left[\frac{\partial p^*}{\partial t} + m^2 \left(\frac{\partial p^* u/m}{\partial x} + \frac{\partial p^* v/m}{\partial y} \right) \right] d\sigma' \quad (3.7)$$

je v modeli použitá k výpočtu zovšeobecnenej vertikálnej rýchlosti, $\dot{\sigma}$, na jednotlivých vertikálnych hladinách. Rovnica 3.4 vychádza z I. vety termodynamickkej (t. j. zákonu zachovania energie) a predstavuje prognostickú rovnicu pre termodynamickú teplotu, T . Poslednou rovnicou sústavy (t. j. rovnica 3.5) je rovnica hydrostatickej rovnováhy (t. j. pohybová rovnica vo vertikálnom smere v hydrostatickej aproximácii). Ako je vidieť z jej tvaru, v modeli slúži k výpočtu geopotenciálnych výšok hladín, Φ , z poľa virtuálnej teploty, T_V , ktorá je definovaná ako:

$$T_V = T(1 + 0,608q_v), \quad (3.8)$$

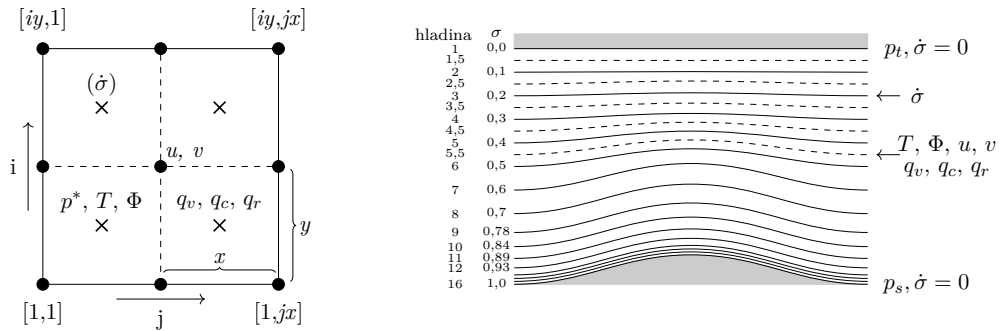
kde: T je termodynamická teplota a q_v je zmiešavací pomer vodnej pary.

Dáta potrebné k vytvoreniu simulácií klímy, t. j. poľa terestrických a meteorologických prvkov*, vyjadrené v geografickom súradnicovom systéme Zeme sa v RegCM 4.6 transformujú (interpolujú) do horizontálnych ploch (štruktúra

*Terestrickými prvkami sú myslené napr. topografia, maska rozložení oceánu a pevnín, fyziografia zemského povrchu, teplota povrchu mora (SST); meteorologické prvky potrebné k simuláciám, ako je evidentné zo sústavy rovníc 3.1–3.5, sú: prízemná teplota vzduchu, prízemný tlak, horizontálne zložky rýchlosti prúdenia, teplota vzduchu a zmiešavací pomer vodnej pary (Giorgi a kol., 2016).

jednej z nich je pre lepšiu predstavu zobrazená na obr. 3.5 vľavo), a to pomocou jednej zo štyroch kartografických projekcií: Lambertovej konformnej, Mercatorovej, všeobecnej Mercatorovej a stereografickej*. Všetky uvedené projekcie sú konformné, a teda pri transformáciách súradnicových kriviek zachovávajú veľkosti uhlov, ktoré medzi sebou zvierajú. Dĺžkové elementy sa avšak pri projekciách oblastí sférickej plochy do roviny nezachovávajú (Baťka, 2014). Toto skreslenie sa vyjadruje pomocou tzv. koeficientu skreslenia konformnej mapy, ktoré je definované podielom infinitizimálnej dĺžky na mape dS (t. j. v projekčnej rovine) a dĺžky

*Podrobný popis týchto projekcií je možné nájsť napr. v Baťkovej práci (Baťka, 2014).



Obrázok 3.5: Schéma horizontálnej roviny (vľavo) a vertikálnej štruktúry (vpravo) v RegCM 4.6. Horizontálna rovina je rozdelená na $jx \times iy$ buniek s dĺžkami hrán x , resp. y v zonálnom, resp. v meridionálnom smere (v smere osi j , resp. i), pričom platí: $x = y$ a jx , resp. ix je ich počet v smere osi j , resp. i . Fyzikálne veličiny sú v tejto rovine vyčísľované podľa Arakawovej-Lambovej schémy typu B, t. j. v rohoch buniek (na obr. označených symbolom \bullet) sú vyčísľované horizontálne zložky rýchlosti prúdenia u , resp. v v zonálnom, resp. v meridionálnom smere; skalárne veličiny, t. j. termodynamická teplota T , rozdiel tlaku p^* , definovaný rovnicou 3.11, zmiešavací pomer vodnej pary, resp. skondenzovanej vody v oblačnosti a v zrážkach q_v , resp. q_c a q_r , geopotenciálna výška Φ , zovšeobecnená rýchlosť $\dot{\sigma}$, definovaná rovnicou 3.7, a i . sú vyčísľované v centrách buniek (na obr. označených symbolom \times). Vertikálna štruktúra (obr. vpravo) je riešená v σ - p systéme, a to tak, že existujú dva typy hladín s konštantnou hodnotou σ : celočíselné a poločíselné (na obr. zobrazené plnými, resp. prerušovanými čiarami). Poločíselné hladiny predstavujú vyššie popísané horizontálne roviny s tým, že sa na nich nevyčísľujú hodnoty $\dot{\sigma}$. Tie sú vyčísľované v centrách buniek na celočíselných hladinách. V schéme napravo je ilustračne znázornený systém skladajúci sa so 16 celočíselných hladín a 15 poločíselných hladín, kde je kvôli prehľadnosti zobrazených iba prvých päť poločíselných hladín, p_s , resp. p_t označuje prízemný tlak vzduchu, resp. tlak vzduchu zvolený na hornej hranici modelovej atmosféry. Na hladinách $\sigma = 0$ a $\sigma = 1$ sú definované okrajové podmienky pre $\dot{\sigma}$, a to $\dot{\sigma} = 0$. Schémy vychádzajú z analogických schém uvedených v manuáli Elguindiovej a kol. (Elguindi a kol., 2014) a v práci Grella a kol. (Grell a kol., 1994).

jej originálu na Zemi ds (t. j. na projektovanej sfére):

$$m = \frac{dS}{ds}. \quad (3.9)$$

Diskretizácia sústavy rovníc hysrostatického dynamického jadra a taktiež rovníc 3.6 až 3.8, ktorú je možné nájsť v práci Grella a kol. (Grell a kol., 1994), je v horizontálnych rovinách (jedna z nich je schématicky zobrazená na obr. 3.5 vľavo) riešená pomocou Arakawovej-Lambovej schémy typu B a vo vertikálnom smere je realizovaná na hladinách bezrozmernej zovšeobecnenej vertikálnej súradnice σ (schématicky zobrazených na obr. 3.5 vpravo), ktorá je definovaná ako:

$$\sigma = \frac{p - p_t}{p^*}, \quad (3.10)$$

kde je: p – tlak vzduchu na určitej σ hladine, p_t – tlak vzduchu zvolený na hornej hranici modelovej atmosféry a p^* je rozdiel prízemného tlaku vzduchu p_s a tlaku p_t , teda:

$$p^* = p_s - p_t. \quad (3.11)$$

Z rovníc 3.10 a 3.11 je evidentné, že σ môže nadobúdať hodnoty v uzatvorenom intervale od 0 do 1, pričom hladina, na ktorej je $\sigma = 1$ predstavuje povrch oblasti a hladina, na ktorej je $\sigma = 0$ je horná hranica modelovej atmosféry, t. j. izobarická hladina, na ktorej je tlak vzduchu rovný p_t . Ako je vidieť na obr.3.5 (vpravo), hladiny s konštantou hodnotou σ majú tú vlastnosť, že nižšie hladiny tvarom kopírujú terén a smerom nahor sa tvarom postupne blížia k tvaru izobarickej hladiny p_t . Súradnicové systémy s týmito vlastnosťami sa označujú ako tzv. „terén-kopírujúce súradnicové systémy*“.

Numerická časová integrácia sústavy prognostických (t. j. obsahujúcich časové derivácie) rovníc 3.1 až 3.4, spolu s diagnostickou rovnicou 3.5 je v RegCM 4.6 realizovaná pomocou tzv. split-explicitnej metódy (Grell a kol., 1994). Stručne, táto explicitná schéma je založená na odseparovaní členov v rovniciach hydrostatického dynamického jadra, ktoré riadia najrýchlejšie módy vonkajších gravitačných vln od tých, popisujúcich módy Rossbyho vln, keďže práve tie majú (v dôsledku ich veľkej rýchlosti) najväčší vplyv na stabilitu numerickej intergácie, i keď z fyzikálneho hľadiska prenášajú menšiu časť energie voči Rossbyho vlnám. Z tohto dôvodu sú časovo integrované rovnice popisujúce práve Rossbyho módy vln, teda vln pomalších, a vplyv vonkajších gravitačných vln je zahrnutý pomocou korekcií k tomuto riešeniu, čo umožňuje zrýchliť samotnú integráciu (zväčšením časového kroku pri zachovaní platnosti Courant–Friedrichs–Lewyovej podmienky stability riešenia). Elguindiová a kol. (Elguindi a kol., 2014) uvádzajú, že v RegCM 4.6 sú odfiltrované 2 najrýchlejšie módy vonkajších gravitačných vln. Na záver je vhodné podotknúť, že k tvorbe simulácií pomocou tohto dynamického jadra je nutné zvoliť časový krok integrácie, keďže numerické riešenie je založené na explicitnej metóde.

*V anglicky písanej literatúre sa označujú ako *terrain-following coordinate systems* (Elguindi a kol., 2014).

3.2.2 Parametrizácie zabudované v RegCM 4.6

Parametrizáciami, ako už bolo zmienené v úvode tejto kapitoly, sa označujú výpočtové schémy, ktoré v modeli popisujú procesy prebiehajúce na priestorových mierkach menších, ako je priestorové rozlíšenie modelu a na časových mierkach menších, než je dĺžka integračného kroku dynamického jadra. Procesy, ktoré je v modeli nutné parametrizovať, ak má model čo najvernejšie odrážať realitu v klimatickom systéme, tak závisia od požadovaného rozlíšenia modelu. Logicky, čím je rozlíšenie modelu nižšie, tým viac procesov je nutné parametrizovať.

V RegCM 4.6 je k tomuto účelu zabudových veľké množstvo rôznych typov parametrizácií, z ktorých niektoré sú popísané v manuáloch uvedených v úvode tejto kapitoly, ostatné je nutné dohľadať v konfiguračnom súbore modelu, resp. napr. v dokumentáciách jednotlivých zdrojových kódov programov v modeli. Prehľad niektorých z nich (spolu s referenciami na literatútu, kde sú podrobne špecifikované) je uvedený v tab. 3.1. Pretože detailný popis jednotlivých parametrizácií nie je primárnou náplňou tohto stručného popisu modelu, následne sú len stručne popísané tie z nich, ktoré boli použité v simuláciách realizovaných v tejto práci. Parametrizácie, ktoré boli medzi jednotlivými simuláciami menené (t. j. parametrizácie MVA a konvekcie) s cieľom určenia zmien vybraných klimatických prvkov v dôsledku rozdielnych prístupov k popisu fyziky použitej pri ich konštrukcii, sú podrobnejšie popísané v nasledujúcich dvoch podkapitolách.

Procesy späť s prenosom žiarenia atmosférou je nutné parametrizovať v každom klimatickom modeli, keďže prebiehajú na molekulárnej priestorovej škále a súčasne (ako bolo zmienené v úvode práce) slnečné žiarenie predstavuje výhradný zdroj energie pre celý klimatický systém. V oboch radiačných schémach uvedených v tab. 3.1 je zvlášť riešený prenos krátkovlnného a dlhovlnného žiarenia. V práci bola pri simuláciách použitá prvá z uvedených schém, ktorá je modifikovanou verziou radiačnej schémy z modelu NCAR CCM3 (Kiehl a kol., 1996). Prenos krátkovlnného žiarenia (t. j. výpočet reflektivity a transmitivity jednotlivých vertikálnych vrstiev) je v nej riešený pomocou δ -Eddingtonovej aproximácie, pričom slnečné spektrum je rozdelené do 18 diskretných intervalov (7 pre O₃, 1 v oblasti viditeľného svetla, 7 pre H₂O a 3 pre CO₂). Súčasne je v schéme zahrnutý molekulárny rozptyl a absorbica, resp. rozplyl na vodných

Parametrizácia	Označenie	Referencie
radiačného transféru	NCAR CCM3	Kiehl a kol. (1996)
	RRTMG-SW a RRTMG-LW	Atmospheric and Environmental Research
zemského povrchu	BATS 1e	Dickinson, Henderson-Sellers a Kennedy (1993)
	CLM 3.5	Oleson a kol. (2008)
	CLM 4.5	Oleson a kol. (2013)
mikrofyziky oblačnosti	SUBEX	Pal, Small a Eltahir (2000)
	ECMWF	Nogherotto a kol. (2016)
interakcií medzi atmosférou a oceánom	BATS 1e	Dickinson a kol. (1993)
	Zengova	Zeng, Zhao a Dickinson (1998)
MVA	Holtslagova	Holtslag, De Bruijn a Pan (1990)
	UW	Grenier a Brethertohn (2001)
konvekcie	modifikovaná Kuova	Anthes (1977)
	Grellova	Grell (1993)
	Emanuelova	Emanuel a Zivkovic-Rothman (1999)
	Tiedtkeho	Tiedtke (1989)
	Kainova-Fritschova	Kain (2004)

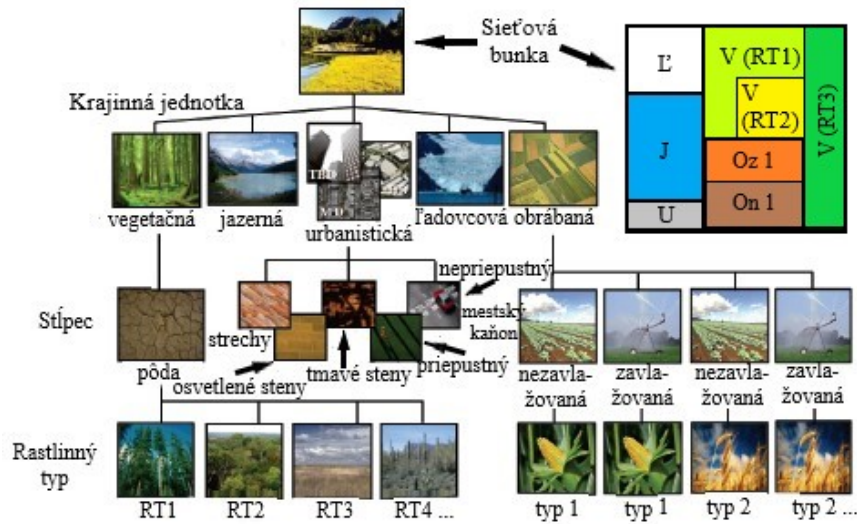
Tabuľka 3.1: Prehľad niektorých parametrizácií zabudovaných v RegCM 4.6.

kvapôčkách. Prenos dlhovlnného žiarenia (prenikajúceho atmosférou zo Slnka na zemský povrch, no taktiež odrazeného, rozptýleného, resp. vyžiareného zemským povrchom, oblačnosťou a molekulami v atmosfére) je riešený pomocou tzv. širokopásmového modelu, a to v ôsmich intervaloch pokrývajúcich spektrum žiarenia v rozmedzí vlnočtov $500\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$. Hlavnými aktívnymi látkami, ktoré prenos v tejto oblasti spektra ovplyvňujú, sú molekuly: H_2O , CO_2 a O_3 , pričom v modeli je okrem nich zahrnutý taktiež vplyv molekúl CH_4 , oxidu dusného (N_2O), trichlórfluórmetánu (CCl_3F) a dichlórdifluórmetánu (CCl_2F_2).

Biogeofyzikálne a biogeochemické procesy prebiehajúce na zemskom povrchu sú ďalšou významnou skupinou procesov, ktoré je do klimatického modelu nutné zahrnúť. Súčasne, ako bolo zmienené v predchádzajúcej podkapitole, jedná sa o procesy, ktoré sú kľúčové pre zvýšenie kvality DD RCMs, preto je žiaduce ich do modelu zahrnúť čo najpresnejšie. V RegCM 4.6 je k tomuto účelu možné použiť jeden z 3 zabudovaných modelov zemského povrchu, uvedených v tab. 3.1. V práci bol pri všetkých simuláciách použitý model CLM 4.5, keďže je z uvedených 3 modelov najnovší a súčasne sa javí ako najdetailnejší, čo sa týka spôsobu zachytenia heterogenity zemského povrchu a procesov, ktoré sú v ňom zahrnuté. Heterogenita zemského povrchu v oblasti najmenej plochy siete (sietovej bunky), reprezentovanej v modeli jediným bodom siete, je v ňom realizovaná mozaikou krajinných jednotiek s trojstupňovou hierarchiou, ktorá je ilustračne znázornená na obr. 3.6. V modeli je uvažované veľké množstvo rôznych procesov, napríklad: absorbcia, odraz a priepustnosť krátkovlnného (slnečného) žiarenia; absorpcia a emisia dlhovlnnej radiácie; toky hybnosti, zjavného a latentného tepla; prenos tepla do pôdy a snehu (s uvážením jeho fázových premien); pokročilá hydrologia v pôde, v snehu a v biosfére; fotosyntéza a stomatálna fyziológia rastlín; ľadovcové procesy; energetická bilancia urbanizovaných oblastí (Oleson a kol., 2013). Výstupmi z tohto modelu sú: tok latentného a cíteného tepla; tok vodnej pary; toky hybnosti v zonálnom a v meridionálnom smere; intenzita absorbovaného slnečného žiarenia, resp. emitovaného dlhovlnného žiarenia; albedá priamej, resp. difúznej zložky žiarenia vo viditeľnej a blízkej infračervenej oblasti; radiačná teplota; teplota vzduchu, resp. merná (špecifická) vlhkosť vzduchu v 2 m nad zemským povrchom; vodná hodnota snehovej pokrývky; aerodynamická rezistencia; frikčná rýchlosť; tok prachových častíc a celková výmena CO_2 ekosystémom, vyjadrená tokom CO_2 v jednotkách $\text{kg}(\text{CO}_2)\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ (Oleson a kol., 2013).

Ďalšou významnou skupinou procesov prebiehajúcou na molekulárnej škále, ktoré je tým pádom nutné parametrizovať, sú mikrofyzikálne procesy spojené s fázovými zmenami vody a so vznikom oblačnosti a zrážok v atmosfére. V závislosti od toho, o aký typ oblačnosti sa jedná, t. j. či ide o oblačnosť vrstevnatú (stratiformnú), resp. o oblačnosť kopovitú (konvektívnu), sú tieto procesy v RegCM 4.6 zahrnuté dvojakým spôsobom.

Výpočty späté s mikrofyzikou stratiformnej oblačnosti je možné realizovať buď pomocou relatívne jednoduchej schémy SUBEX (Pal a kol., 2000), alebo pomocou oveľa prepracovanejšej schémy, v práci označenej ako ECMWF schéma (viď tab. 3.1), ktorá bola vytvorená pôvodne pre NWP model riadený v ECMWF a upravená ku klimatickým simuláciám. Práve z dôvodu detailnejšieho prístupu k tejto skupine procesov (schématicky zobrazených na obr. 3.7) bola ECMWF schéma použitá vo všetkých simuláciách realizovaných v rámci práce. Nogherottová a kol. (Nogherotto a kol., 2016) vypracovali jej popis a spôsob implementácie do modelu



Obrázok 3.6: Schéma hierarchie modelu CLM 4.5. Vpravo hore je schématicky znázornené mozaikové rozloženie jednotlivých krajinných jednotiek v bunke siete. Vľavo zhora nadol je schématicky znázornená trojstupňová hierarchia v modeli, kde prvým stupňom sú krajinné jednotky (v modeli pomenované *land units*), ktorých je celkovo päť, a to: vegetačná (v mozaike napravo označená ako V), jazerná (J), urbanistická (U), ľadovcová (L) a obrábaná (O), druhým stupňom sú stĺpce (v modeli pomenované *columns*), ktoré slúžia k zachyteniu potenciálnej variability v jednotlivých krajinných jednotkách (ich počet závisí od typu krajinných jednotiek) a tretím stupňom sú rastlinné typy (v modeli pomenované ako *Plant Functional Types*), ktoré zachytávajú biogeofyzikálne a biogeochemické rozdiely medzi druhmi rastlín formou rozdielnych funkčných charakteristík, napr. pre vegetačnú krajinnú jednotku ich je zabudovaných 16. V mozaike napravo sú okrem vyššie uvedených oblastí znázornené dve oblasti: Oz1, resp. On1, ktoré predstavujú zavlažovanú, resp. nezavlažovanú obrábanú oblasť s pokrytím typu 1. Obrázok bol prevzatý a upravený z manuálu Olesona a kol. (Oleson a kol., 2013).

RegCM (presnejšie do verzie 4.3, od ktorej je v modeli dostupná). Stručne, voda v atmosfére je v ECMWF schéme reprezentovaná pomocou zmiešavacích pomerov piatich fáz, a to: vodnej pary q_v , oblačnej vody q_c , oblačného ľadu q_i , dažďu q_r a snehu q_s . Všetky sú počítané prognosticky, a tak k rovniciam dynamického jadra (uvedených v stati 3.2.1) pribúda ďalších päť rovníc typu:

$$\frac{dq_x}{dt} = S_i + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} (\rho q_x v_x) + D, \quad (3.12)$$

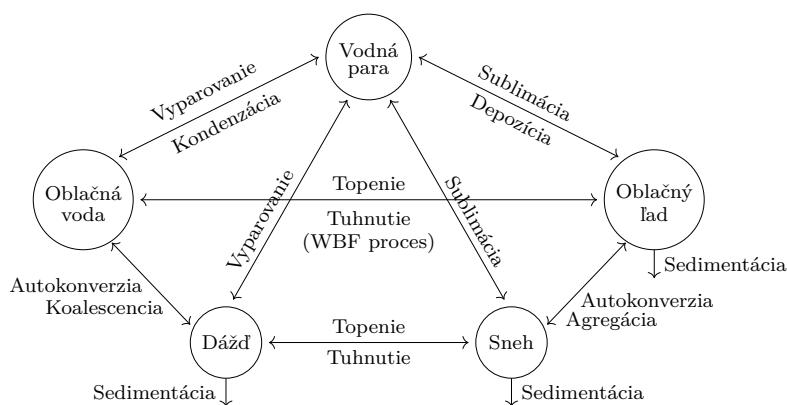
kde x je: v , c , i , r a s . Tieto rovnice reprezentujú zákony zachovania jednotlivých zmiešavacích pomerov (rovnice kontinuity), pričom: d/dt je operátor horizontálnej časovej derivácie, t. j. okrem lokálnej časovej zmeny zmiešavacieho pomeru zahŕňa taktiež zmeny v dôsledku jeho advekcie veľkoškálovým horizontálnym prúdením; S_i sú zdroje a prepady jednotlivých fáz vody spôsobené mikrofyzikálnymi procesmi medzi nimi pôsobiacimi, ktoré sú uvedené na obr. 3.7; ρ je hustota vzduchu, v_x je pádová rýchlosť vybraných vodných fáz (v schéme uvažovaná pre oblačný ľad, dažď a sneh), $\partial/\partial z$ je parciálna derivácia vo vertikálnom smere, a teda druhý

člen na pravej strane rovníc popisuje zmeny zmiešavacích pomerov fáz vody ich sedimentáciou z vyššej modelovej vrstvy atmosféry a D zahŕňa ostatné procesy transportu, zdrojov a prepadov fáz v dôsledku parametrizovaných diabatických procesov, ako sú difúzia či konvekcia. Ako uvádzajú Nogherottová a kol. vo vyššie citovanej práci, jedným z cieľov začlenenia tejto schémy do RegCM je zachytenie časových zmien a vývoja oblačnej vody a ľadu v zmiešanej oblačnosti, keďže v schéme SUBEX je prognosticky počítaný iba zmiešavací pomer oblačnej vody a zmiešavací pomer oblačného ľadu je (v závislosti od lokálnej teploty za predpokladu platnosti rovnováhy medzi týmito zložkami) určený diagnosticky. Inými slovami povedané, v schéme SUBEX sa predpokladá, že tieto procesy prebiehajú na časových škálach menších, než je časový krok integrácie modelu. Ako však ďalej argumentujú, takýto predpoklad nemusí byť v súlade s realitou, keďže bola pozorovaná koexistencia vodných a ľadových častíc v zmiešanej oblačnosti po dobu hodín až dní.

Mikrofyzikálne procesy späté s kopovitou oblačnosťou (podmienenu konvekciou) sú zabudované v parametrizáciách konvekcie, o ktorých je podrobnejšie pojednané v podkapitole 3.4.

Subgridové procesy sprostredkujúce interakcie medzi oceánom a atmosférou (reprezentované tokmi hybnosti, tepla a vodnej pary) boli vo všetkých simuláciách klímy v práci počítané Zengovou schémou (Zeng a kol., 1998).

Pre úplnosť je vhodné dodať, že v modeli RegCM 4.6 je taktiež zabudovaných celkovo 11 rôznych schém chemizmu atmosféry. V dôsledku neprekonateľných problémov spätých s nestabilitami riešenia pri realizáciách behov modelu pri ich použití, teda presnejšie so schémou chemizmu plynnej fázy (v modeli označenej ako CBMZ), ako aj so schémou chemizmu plynnej fázy a aerosólov (v modeli označenej ako DCCB), nie sú v práci ďalej zmiňované. Ich prehľad je možné nájsť v článku Giorgiho a kol. (Giorgi a kol., 2016).



Obrázok 3.7: ECMWF schéma mikrofyziky stratiformnej oblačnosti zabudovaná do RegCM 4.6. Kružnice, v ktorých sú pomenovania diagnosticky určených fáz vody v tejto schéme, sú vzájomne prepojené šípkami, pri ktorých sú uvedené uvažované parametrizované mikrofyzikálne procesy. WBF proces je skráteným označením Wegenerovho–Bergeronovho–Findeisenovho procesu. Schéma je prevzatá a upravená z práce Nogherottovej a kol. (Nogherotto a kol., 2016).

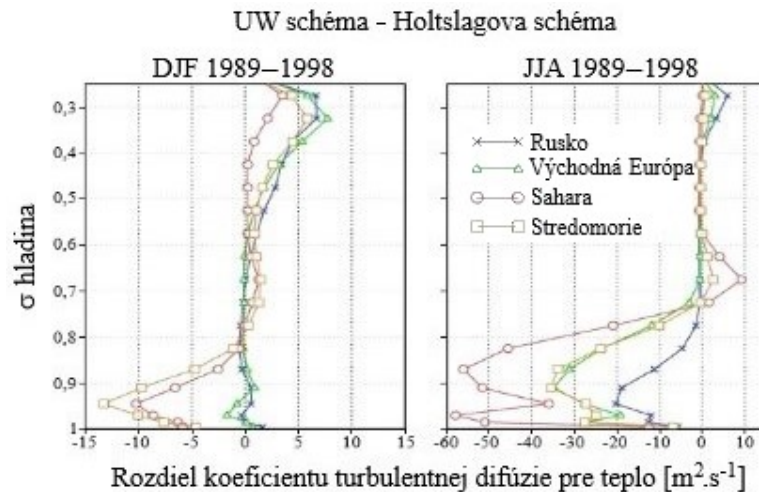
3.3 Parametrizácie MVA použité v simuláciách klímy

Parametrizácie MVA sú do klimatických modelov (prirodzene aj do NWP modelov a LAMs) zabudované s cieľom popísať efekty turbulencie v MVA, keďže tá, ako napr. uvádza Güttler a kol. (2014):

- významne ovplyvňuje vertikálne toky hybnosti, tepla a hmotnosti medzi zemským povrchom a VT, pričom toky cíteného a latentného tepla, vyvolané práve turbulenciou, sú hlavnými zložkami, ktoré ovplyvňujú tepelnú bilanciu zemského povrchu (popísanú v poznámke na strane 47);
- prebieha na omnoho menších priestorových škálach ($\approx 10\text{--}1000\text{ m}$) než je rozlíšenie RCMs ($\approx 1\text{--}100\text{ km}$).

Celkom prirodzené je teda predpokladať, že rozdiely tokov vyššie zmienených fyzikálnych veličín, podmienené rozdielnou formuláciou parametrizácií MVA, by sa mali odzrkadliť v rozdielnosti polí prognosticky modelovaných meteorologických prvkov, a to prostredníctvom rozdielných príspevkov členov D_u , D_v , resp. D_T v rovniciach 3.1, 3.2, resp. 3.4. Rovnako sa dá predpokladať, že v závislosti od použitia rôznych parametrizácií MVA môže dôjsť k menším alebo k výraznejším zmenám hodnôt veličín popisujúcich práve mieru turbulencie, napríklad koeficientov turbulentnej difúzie. Príkladom štúdie potvrdzujúcej tieto predpoklady v modeli RegCM je napr. vyššie citovaná práca Güttlera a kol. Tí pomocou modelu RegCM verzie 4.2 simulovali klímu v Európe a v jej okolí pre obdobie rokov 1989–1998 s rôznymi nastaveniami parametrizácií MVA, konkrétne s použitím Holtslagovej schémy a UW schémy, ktoré sú taktiež jediné 2 parametrizácie MVA zabudované aj v práci použitom modeli RegCM 4.6. Na obr. 3.8 sú pre ilustráciu zobrazené vertikálne profily rozdielu priemerov koeficientu turbulencie pre teplo, K_H , medzi behom modelu s použitím UW schémy a Holtslagovej schémy v zimných (DJF), resp. v letných (JJA) sezónach (obr. vľavo, resp. obr. vpravo) vo vybraných regiónoch Ruska, východnej Európy, Sahary a Stredomoria (geografické súradnice jednotlivých regiónov, vrátane ostatných parametrov nastavenia simulácií je možné nájsť vo vyššie citovanej práci). Už na prvý pohľad je z nich evidentné, že použitie týchto dvoch schém MVA výrazným spôsobom ovplyvňuje K_H , pričom autori v článku uvádzajú, že:

- UW schéma sa javí ako menej difúzna (keďže rozdiely K_H sú najmä záporné), čo naznačuje, že v nej dochádza k menšiemu vertikálnemu turbulentnému premiešavaniu, ako pri použití Holtslagovej schémy;
- výskyt vrstvy s väčšími hodnotami K_H pri použití UW schémy blízko hladiny $\sigma = 0,3$ (t. j. na tlakovej hladine okolo 330 hPa) v regiónoch Ruska a východnej Európy počas zimných sezón by mohol byť spätý s turbulentným premiešavaním indukovaným strihom vetra v blízkosti tryskového prúdenia;
- štruktúra s dvomi píkmi medzi hladinami $\sigma = 1$ a $\sigma = 0,9$ v letných sezónach nad východnou Európou a Saharou (menej evidentná nad Ruskom a Stredomorím) je dôsledkom o trochu nižšie položeného maxima K_H a prudkého nárastu K_H od zemského povrchu nahor pri použití UW schémy.



Obrázok 3.8: Ilustrácia vertikálnych profilov rozdielu priemerov koeficientu turbulentnej difúzie pre teplo, K_H , uvedených v jednotkách $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, medzi simuláciou klímy modelom RegCM verzie 4.2 s použitím UW schémy a Holtslagovej schémy MVA v zimných (DJF), resp. v letných (JJA) sezónach (obr. vľavo, resp. vpravo) v období rokov 1989–1998 vo vybraných regiónoch Ruska, východnej Európy, Sahary a Stredomoria. Obrázky boli prevzaté a upravené z práce Güttlera a kol. (Güttler a kol., 2014).

Na základe týchto výsledkov (ako aj ďalších tu neuvedených, napr. rozdielov profilov priemernej teploty vzduchu a zmiešavacieho pomeru vodnej pary, ktoré je možné nájsť v citovanom článku), je teda možné predpokladať výrazné rozdiely v koncentráciách znečisťujúcich prímiesí (najmä teda v MVA) pri použití polí meteorologicky prvkov získaných zo simulácií modelom RegCM 4.6 s uvedenými 2 schémami ako riadiacich polí pre simulácie modelom CAMx 6.5, keďže tie ovplyvňujú nielen samotný chemizmus, mikrofyziку, radiačný transfér a dynamiku troposféry, ale zároveň aj väzby medzi nimi.

Podrobný popis originálov oboch schém MVA implementovaných do RegCM je možné nájsť v článkoch uvedených v tab. 3.1. Holtslagova schéma vo verziách RegCM vyšších než 4.2 je upravenou verziou originálnej schémy tak, aby boli redukované nedostatky polí meteorologických prvkov simulovaných pri jej použití v porovnaní s poliami pozorovanými, medzi ktoré patria (Giorgi a kol., 2012):

- výrazný vertikálny prenos vlhkosti v MVA (vo výsledku vedúci k jej nízkym hodnotám pri zemskom povrchu a jej nadhodnocovaniu v oblasti hornej hranice MVA) – z tohto dôvodu bola v schéme odstránená protiváha (v anglicky písanej literatúre ozačovaná ako *countergradient*) pre vodnú paru;
- výrazný vertikálny prenos hybnosti, tepla a vlhkosti v prípade veľmi stabilného zvrstvenia – tento problém bol redukovaný definovaním podmienky veľmi stabilného zvrstvenia, pri ktorej splnení sú v schéme všetky koeficienty turbulentnej difúzie a protiváh rovné nule.

Na záver tejto podkapitoly je aspoň stručne zhrnutý popis oboch schém (vychádzajúc opäť z práce Güttlera a kol. (Güttler a kol., 2014)) s cieľom poukázať na ich rozdielne formulácie, keďže práve tie sú výsledkom vyššie uvedených zmien

polí meteorologických prvkov. Rozdiely medzi Holtslagovou a UW schémou spočívajú napr. v ich:

- lokálnosti a ráde, pričom:
 - Holtslagova schéma (skonštruovaná pre potenciálnu teplotu a špecifickú vlhkosť) patrí medzi tzv. nelokálne schémy MVA 1. rádu, keďže vertikálny turbulentný tok fyzikálnej veličiny X vyvolaný turbulenciou, F_X , sa uvažuje v tvare (Elguindi a kol., 2014):

$$F_X = -K_X \left(\frac{\partial X}{\partial z} - \gamma_X \right), \quad (3.13)$$

kde: F_X a X sú popísané vyššie, K_X je koeficient turbulentnej difúzie pre X , $\partial/\partial z$ je operátor parciálnej derivácie vo vertikálnom smere a γ_X je protivážny transportný člen (vyššie zmienený ako protiváha), pričom vertikálny profil K_X sa určuje pomocou globálnych (nelokálnych) charakteristík MVA, konkrétne v tejto schéme na základe výšky MVA a Monin-Obhukovovej dĺžky. Giorgi a kol. (2012) popísali stručný algoritmus výpočtu tejto schémy následne: „*V Holtslagovej schéme sa ako prvá iteračnou procedúrou (s využitím formulácie kritického hromadného Richardsonovho čísla) diagnosticky určuje výška MVA. Následne sa nelokálne vertikálne profily turbulentnej difúzie pre teplo, vlhkosť a hybnosť špecifikujú od povrchu po výšku MVA a pričlenia sa protivážne transportné členy k potenciálnej teplote a špecifickej vlhkosti. Turbulentná difuzivita pritom závisí od: frikčnej rýchlosti, výšky, Monin-Obhukovovej dĺžky a výšky MVA.*“

- UW schéma (skonštruovaná pre horizontálne zložky rýchlosti, lineari-zovanú potenciálnu teplotu kvapalnej vody a zmiešavaci pomer celkového obsahu vody vo vzduchu) patrí medzi tzv. lokálne schémy 1,5. rádu, keďže k vyjadreniu turbulentných tokov hybnosti, tepla a vlhkosti sa taktiež používa vyššie uvedevný vzťah (v tomto prípade avšak bez protiváh), pričom k určeniu vertikálneho profilu K_X sa používa vzťah lokálnych charakteristík MVA (Grenier a Brethertohn, 2001; Güttler a kol., 2014), konkrétne:

$$K_X = l S_X \sqrt{2e}, \quad (3.14)$$

kde: l je dĺžková škála turbulencie, S je stabilitná funkcia a e je turbulentná kinetická energia (TKE), ktorá je počítaná prognosticky (k rovniciam dynamického jadra pribúda ďalšia rovnica, čo sa prejavuje mier-nym predĺžením simulácie pri použití tejto schémy voči výpočtu pomocou Holtslagovej schémy), a to pomocou rovnice:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial t} + u \frac{\partial e}{\partial x} + v \frac{\partial e}{\partial y} + w \frac{\partial e}{\partial z} = \\ = -K_H N^2 + K_M S_f^2 + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_e \frac{\partial e}{\partial z} \right) - B \frac{e^{3/2}}{l} + D, \end{aligned} \quad (3.15)$$

kde: e , K_H , l a $\partial/\partial z$ sú popísané vyššie, w je vertikálna zložka rýchlosti prúdenia, N je Bruntova-Väisäläova frekvencia, S_f je strih vetra,

K_M , resp. K_e je koeficient turbulentnej difúzie pre hybnosť, resp. TKE, B je konštanta, D popisuje horizontálnu difúziu a význam ostatných veličín a operátorov je rovnaký ako v rovniciach 3.1–3.4. Ako je vidieť z jej pravej strany, lokálne zmeny TKE sú riadené: produkciou, resp. deštrukciou TKE podmienenou vztlakovou silou (1. člen), produkciou TKE podmienenou strihom vetra (2. člen), vertikálnym turbulentným tokom TKE (3. člen), turbulentnou disipáciou TKE (4. člen) a horizontálnou difúziou TKE (5. člen).

- príčin vyvolávajúcich turbulenciu, pričom:
 - v Holtsalgovej schéme sú nimi: trenie vzduchu o zemský povrch, vertikálny strih vetra a ohrev zemského povrchu slnečným žiarením a s ním spätá statická stabilita atmosféry;
 - v UW schéme je navyše okrem faktorov zmienených v Holtsalgovej schéme uvažovaný taktiež vplyv vztlakových perturbácií, ktoré sú vyvolané ako vťahovaním vzduchu z VT do MVA, tak ochladzovaním vrcholov oblačnosti v dôsledku emisie dlhovlnnej radiácie z nich do okolia.

3.4 Parametrizácie konvekcie použité v simuláciách klímy

Druhou zo skupín parametrizácií zabudovaných do RegCM 4.6, ktoré boli medzi jednotlivými simuláciami modelu v práci mené, sú parametrizácie konvekcie. Do modelu RegCM 4.6 je celkovo implementovaných 5 parametrizácií konvekcie, viď tab. 3.1. Z nich boli v práci použité 2 tzv. parametrizácie toku hmotnosti (v anglicky písanej literatúre *mass-flux parametrizatio*s), Grellova a Tiedtkeho, ktoré sú nižšie stručne popísané.

Všeobecne, úlohou parametrizácií konvekcie je do modelu zahrnúť transport vlhosti a tepla (popr. i ďalších fyzikálnych parametrov) ňou podmienený a taktiež s ňou spätý potenciálny vývoj kopovitej oblačnosti (oblakov druhu cumulus či cumulonimbus) a zrážok, ktorá je pri použití RCMs s horizontálnym rozlíšením v ráde niekoľkých desiatok km (konkrétne, v práci boli simulácie realizované s horizontálnym rozlíšením siete 27×27 km) modelom nerozlišiteľná. V sieťových bunkách s horizontálnymi rozmermi desiatok km sa pritom môže vyskytovať celé spektrum kopovitých oblakov v rôznom štádiu vývoja. Ako bolo zmienené v stati 3.2.1, tento typ parametrizácie je do modelu počítajúceho polia meteorologických prvkov s predpokladom platnosti hydrostatickej rovnováhy nutné vždy začleniť, keďže ten už principiálne konvekciu neumožňuje. V opačnom prípade by pri výpočte modelu pracujúcom s vyšším priestorovým rozlíšením (teda s termobarickým polom a polom prúdenia výrazne nehomogénnejším, ako sú príslušné polia pri nižšom rozlíšení) s veľkou pravdepodobnosťou vznikli oblasti, v ktorých by horizontálnou advekciou tepla, vlhosti a i. (napr. na úpäť orografických prekážok) dochádzalo k ich nefyzikálnemu kumulovaniu, čo by viedlo ku vzniku numerických instabilit spätých s ukončením výpočtu. Okrem toho, ako bolo uvedené v podkapitole 3.1, kvalita parametrizácií konvekcie je pokladaná za jednu z rozhodujúcich pri zvyšovaní kvality DD RCMs, preto je vhodné otestovať, ako rôzne prístupy

k jej reprezentácii v modeli vplývajú na kvalitu modelových výstupov či už meteorologických prvkov samotných, ako aj na koncentráciu polutantov získaných simuláciami, ktoré sú takýmto poľami riadené.

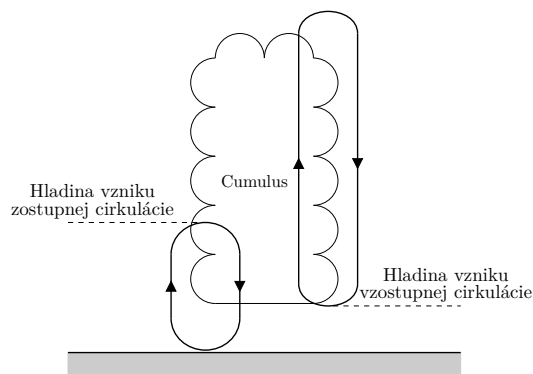
Grellova schéma

Grell (1993) navrhol schému konvekcie, v ktorej sa vyššie zmienené spektrum kopovitej oblačnosti v sieťovej bunke nahradzuje jediným oblakom, ktorý je reprezentovaný systémom dvoch cirkulácií, vzostupnej a zostupnej, ako je ilustrované na obr. 3.9. Ďalej sa v nej predpokladá, že obe cirkulácie sú v rovnováhe s okolitým vzduchom, s výškou sa v oblaku nemení normovaný tok hmotnosti a ku vťahovaniu* vzduchu medzi ním a okolím dochádza len na jeho vrchole, resp. na jeho základni. Spúšťačom konvekcie je pritom podmienka, že vzduchová častica v sieťovej bunke pri jej zdvíhaní v stĺpci modelu dosiahne hladinu voľnej konvekcie. Hladina vzostupnej, resp. zostupnej cirkulácie je určená vo výške, kde pri výstupe vzduchová častica dosahuje maximum, resp. minimum vlhkej statickej energie. Veľkosť toku hmotnosti v zostupnej cirkulácii oblaku je v danej hladine modelu závislá od veľkosti toku hmotnosti v tejto hladine v cirkulácii vzostupnej, ďalej od pomeru normovaného množstva vody, ktoré skondenzuje vo vzostupnej cirkulácii v tejto hladine a toho, ktoré sa v nej vyparí v zostupnej cirkulácii a taktiež od faktoru (závisiaceho od strihu vetra), ktorý vyjadruje frakciu skondenzovanej vody vzniknutej vo výstupnej cirkulácii, ktorá sa vyparí v cirkulácii zostupnej (Grell, 1993; Elguindi a kol., 2014). V RegCM 4.6 je množné túto schému uzavrieť 2 spôsobmi, a to buď pomocou Arakawovho-Schubertovho uzáveru (Arakawa a Schubert, 1974), alebo pomocou Fritschovho-Chappellovho uzáveru (Fritsch a Chappell, 1980), pričom pri simuláciách realizovaných v diplomovej práci bol použitý druhý z nich. Uzáverom sa v parametrizáciách konvekcie všeobecne myslí spôsob určenia toku hmotnosti skrz základňu oblačnosti, od ktorého závisí celkové množstvo energie, ktoré sa konvekciou transportuje. V prípade použitého Fritschovho-Chappellovho uzáveru sa uvažuje, že ten je priamoúmerne závislý od množstva voľnej dostupnej energie a nepriamoúmerný od časovej škály, na ktorej konvekciou dochádza k transportu tejto energie a od rýchlosti zmeny tejto energie prislúchajúcej jednotkovému toku hmotnosti vo výstupnej cirkulácii skrz základňu oblaku (Fritsch a Chappell, 1980; Elguindi a kol., 2014).

Tiedtkeho schéma

Tiedtke (1989) navrhol schému konvekcie, v ktorej je spektrum rôzne vyvinutej kopovitej oblačnosti v sieťovej bunke taktiež parametrizované pomocou hromadných veličín. Na rozdiel od Grellovej schémy je v tejto schéme pri konvekcii (okrem výstupného a vzostupného prúdu a vťahovania vzduchu z/do oblačnosti na vrchole/základni oblačnosti) uvažované taktiež vťahovanie vzduchu z/do oblačnosti aj skrz jej bočné hranice. Vyššie zmienenými hromadnými veličinami sú tak: tok hmotnosti skrz základňu oblačnosti, rýchlosti vťahovania hmoty z/do oblačnosti na vrchole/základni oblaku vyvolané organizovanou veľkoškálovou konvergenciou/divergenciou, ako aj rýchlosti vťahovania hmoty z/do oblačnosti skrz bočné hranice oblačnosti vyvolané turbulentnou výmenou. Súčasne, na rozdiel od

*V anglicky písanej literatúre sa pre vťahovanie okolitého vzduchu do oblačnosti používa výraz *entrainment*, pre proces opačný sa používa výraz *detrainment*.



Obrázok 3.9: Ilustrácia Grellovej schémy konvekcie. Obrázok bol prevzatý a upravený z manuálu Grella a kol., viď Grell a kol. (1994).

Grellovej schémy sa v Tiedtkeho schéme uvažujú tri druhy konvekcie, ku ktorej môže dochádzať. Sú nimi konvekcia: hlboká, plytká a vysoká. Hlboká (prenikajúca), resp. plytká konvekcia sú pritom typické tým, že sa vyvíjajú v MVA a líšia sa vertikálnym rozsahom kam dosahujú, ku konvekcii vysokej dochádza nad MVA. V schéme závisí tok hmotnosti v zostupnom prúde z hladiny, kde dochádza k jeho vzniku, od toku hmotnosti v prúde vzostupnom skrz základňu oblačnosti, a to úmerne cez voliteľný parameter. Hladina, kde dochádza ku vzniku vzostupného prúdu je pritom počítaná z predpokladu, že sa jedná o najvyššiu hladniu v modeli, kde na vzduchovú časticu s rovnakým obsahom oblačného a saturovaného okolitého vzduchu začne vzhľadom k teplote okolia pôsobiť záporný vztlak. Vhodné je upozorniť na to, že rýchlosti vťahovania z/do oblačnosti vo výstupnom prúde (podmienené veľkoškálovou konvergenciou/divergenciou) závisia od typu konvekcie, ku ktorej dochádza. O type konvekcie, ku ktorej dochádza, rozhodujú výšky základne a vrcholu oblačnosti, ktoré sú v schéme počítané ako v prípade schémy navrhnutej Arakawom a Shubertom (Arakawa a Schubert, 1974). Uzáver schémy pre hlbokú a vysokú konvekciu je tak počítaný z konverencie vlhkosti vyvolanej veľkoškálovými pohybmi, v prípade plytkej konvekcie je tok hmotnosti skrz základňu oblačnosti počítaný z množstva vlhkosti, ktorá sa odparuje zo zemského povrchu.

4. Popis CAMx 6.50 a jeho *offline* prepojenia s RegCM 4.6

4.1 Popis CAMx 6.50

Model CAMx 6.50 je sofistikovaný, eulerovský CHTM so širokou paletou možností nastavenia, tak aby umožňoval simulácie prenosu a chemizmu znečisťujúcich prímiesí od mikroškálovej priestorovej mierky až po mierku planetárnu. Veľmi podrobný popis tejto verzie modelu CAMx je možné nájsť v užívateľskom manuáli, viď Ramboll Environment and Health (2018), ktorý je ďalej v práci uvádzaný už len ako REH (2018). Ten bol hlavným zdrojom naštudovaných informácií o modeli, ktoré boli použité pri tvorbe nižšie uvedeného popisu. Popis je pritom zameraný najmä na komponenty modelu, ktoré boli pri simuláciach v práci použité.

4.1.1 Jadro modelu a diskretizácia siete

Ako je uvedené vyššie, CAMx 6.50 je CHTM eulerovský, t. j. koncentrácie chemických látok sú v ňom počítané na základe Eulerovho prístupu k popisu dynamiky poľa, teda zadaním poľa prúdenia (vektorov rýchlosti vetra) v dostatočne hustej sieti bodov, ktorá pokrýva oblasť záujmu. Presnejšie, priemerné hodnoty stavových veličín (vrátane koncentrácií chemických látok) sú v CAMx 6.50 vyčísľované v centrách sieťových buniek (jedna z nich je ilustračne zobrazená na obr. 4.1), pričom tieto hodnoty platia pre celý objem sieťových buniek. Naopak, zložky rýchlosti prúdenia a koeficientov turbulentnej difúzie sú definované v centrách stien sieťových buniek. Jedná sa tak o vyčísľovanie pomocou Arakawovej-Lambovej schémy typu C.

Z hľadiska dynamiky model vychádza z rovnice kontinuity (zákonu zachovania hmotnosti), ktorá je riešená pre priemerné koncentrácie jednotlivých chemických látok v sieťových bunkách. Uvažovanými fyzikálnymi a chemickými procesmi, ktoré vedú k zmenám koncentrácie chemickej látky v objeme sieťovej bunky, sú pritom:

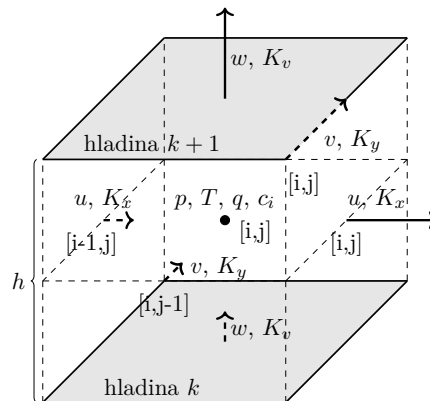
- horizontálna a vertikálna advekcia, resp. turbulentná difúzia;
- emisia chemickej látky do danej bunky, chemické reakcie v plynnej fáze a chémia aerosólov;
- suchá a mokrá depozícia chemických látok.

Vychádzajúc z rovnice kontinuity, pre časovú deriváciu priemernej koncentrácie i -tej chemickej látky, c_i , (pričom c_i je v modeli vyjadrená v $\mu\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ pre plyny

a v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ pre aerosóly) platí:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i}{\partial t} = & -\frac{m^2}{A_{yz}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u A_{yz} c_i}{m} \right) - \frac{m^2}{A_{xz}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{v A_{xz} c_i}{m} \right) + \left[\frac{\partial(c_i \zeta)}{\partial z} - c_i \frac{\partial^2 h}{\partial z \partial t} \right] + \\ & + m \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[m \rho K_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{c_i}{\rho} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[m \rho K_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{c_i}{\rho} \right) \right] \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\rho K_v \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{c_i}{\rho} \right) \right] + m^2 \frac{E_i}{\partial x \partial y \partial z} - \Lambda_i c_i + \left(\frac{\partial c_i}{\partial t} \right)_{chem}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

kde: A_{yz} , resp. A_{xz} sú veľkosti plôch sieťovej bunky v y - z , resp. x - z rovine; ζ je celková rýchlosť vertikálneho transportu, definovaná rovnicou 4.2; h je výška medzi dvomi horizontálnymi hladinami (viď obr. 4.1); ρ je priemerná hustota vzduchu; K_x , K_y , resp. K_v sú koeficienty turbulentnej difúzie pre hybnosť v smere osi x , y , resp. z ; E_i je lokálna rýchlosť emisie i -tej chemickej látky (v modeli vyjadrená v jednotkách: $\mu\text{mol}\cdot\text{s}^{-1}$ pre plyny a $\mu\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$ pre aerosóly), Λ_i je koeficient mokrého vymývania (v anglicky písanej literatúre označovaný ako *wet scavenging coefficient*) pre i -tu chemickú látku, popísaný rovnicou 4.8, resp. 4.9 v prípade aeerosólov, resp. plynov a význam ostatných veličín a operátorov je rovnaký ako v rovniciach 3.1–3.4, resp. v rovnici 3.13.



Obrázok 4.1: Schéma sieťovej bunky v CAMx6.50 medzi horizontálnymi hladinami k a $k+1$, ktorých vzdialenosť je h . Fyzikálne veličiny sú v nej vyčísľované podľa Arakawovej-Lambovej schémy typu C, teda priemerné hodnoty skalárnych veličín, ako napr. tlaku, p , termodynamického teploty, T , zmiešavacieho pomeru, q , koncentrácie i -tej chemickej látky, c_i , sú vyčísľované v centre sieťovej bunky (na obr. označenom symbolom \bullet); hodnoty zložiek rýchlosti prúdenia v horizontálnej rovine, resp. vo vertikálnom smere, u , v , resp. w , ako aj koeficienty turbulentnej difúzie pre hybnosť v zonálnom, v meridionálnom, resp. vo vertikálnom smere, K_x , K_y , resp. K_v , a celková rýchlosť vertikálneho transportu, ζ , definovaná pomocou rovnice 4.2, sú vyčísľované uprostred horizontálnych, resp. vertikálnych stien sieťovej bunky. V schéme je taktiež ukázané indexovanie centra sieťovej bunky, resp. jej stien použité v modeli. Schéma vychádza zo schémy uvedenej v užívateľskom manuáli REH (2018).

Jednotlivé členy na pravej strane rovnice 4.1 sú v modeli riešené separátne rôznymi numerickými metódami, pričom fyzikálne reprezentujú časovú zmenu koncentrácie i -tej chemickej látky v dôsledku:

- horizontálnej advekcie v zonálnom, resp. v meridionálnom smere (1., resp. 2. člen), ktorá bola v práci počítaná po častiach parabolickou metódou (Colella a Woodward, 1984),
- vertikálnej advekcie (3. člen), kde celková rýchlosť vertikálneho transportu chemickej látky, ζ , je počítaná pomocou rovnice:

$$\zeta = \frac{\partial h}{\partial t} - w, \quad (4.2)$$

pričom: h je už zmienená výška medzi dvomi hladinami a w je vertikálna rýchlosť prúdenia, ktorá je počítaná z rovnice kontinuity v každom stĺpci modelu s dolnou okrajovou podmienkou nulovej vertikálnej rýchlosti prúdenia na zemskom povrchu, t. j. integráciou rovnice:

$$\rho w(z) = - \int_0^z \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \right] dz \quad (4.3)$$

od zemského povrchu po najvyššiu hladinu modelu, pričom polia horizontálnych zložiek rýchlosti prúdenia, u , v , ako aj pole lokálnej časovej zmeny hustoty, $\frac{\partial \rho}{\partial t}$, v každom kroku časovej integrácie modelu sú známe (polia u , v i ρ predstavujú vstupné dáta do modelu). Numerický výpočet vertikálnej advekcie je pritom realizovaný pomocou upravenej verzie implicitnej, spätnej Eulerovej integrácie (Emery a kol., 2011);

- horizontálnej turbulentnej difúzie (4. člen), pričom toky chemickej látky vyvolané turbulenciou v zonálnom, resp. v meridionálnom smere sú do modelu zahrnuté uzáverom turbulencie 1. rádu (obdobne ako napr. v Holtslagovej i v UW schéme (rovnica 3.13 avšak bez protiváhy, γ_X) a s tým rozdielom, že derivovanie v tomto prípade prebieha v smere osí x , resp. y), pričom koeficienty turbulentnej difúzie K_x a K_y sú počítané pomocou rovnice:

$$K_{x,y} = K_0 + \frac{\Delta x \Delta y}{4\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (4.4)$$

kde: Δx , resp. Δy je veľkosť hrany sieťovej bunky v zonálnom, resp. v meridionálnom smere; K_0 je koeficient turbulencie difúzie pozadia a význam ostatných fyzikálnych veličín a operátorov je rovnaký ako v rovniciach 3.1–3.4. Pritom K_0 je počítaný pomocou vzťahu:

$$K_0 = 3 \times 10^{-3} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}, \quad (4.5)$$

kde: Δt je dĺžka časového kroku integrácie modelu a význam ostatných veličín je rovnaký ako v rovnici vyššie. Tento výpočet je v modeli riešený explicitne, výpočtom plošnej divergenie prúdenia.

- vertikálnej turbulentnej difúzie (5. člen), pričom výpočty časových zmien objemových koncentrácií chemickej látky v dôsledku jej toku vyvolaného turbulenciou vo vertikálnom smere (ten je rovnako ako pri horizontálnej turbulencijnej difúzii vyjadrený uzáverom turbulencie 1. rádu) sú v modeli počítané implicitnou, spätnou Eulerovou integráciou, kde koeficienty K_v sú známe (ich polia sú taktiež vstupnými dátami do modelu). Navyše, pri tomto výpočte je zahrnutý aj vplyv suchej depozície v prízemnej vrstve (t. j. v najnižšej modelovej vrstve), a to použitím toku chemickej látky vyvolanej suchou depozíciou ako spodnej okrajovej podmienky. Suchá depozícia chemických látok je pritom v modeli riešená zvlášť pre aerosóly a plyny. Pri výpočtoch použitých v práci boli použité koncepty suchej depozície vypracované Zhangom a kol. ako pre plyny (Zhang a kol., 2003), tak pre aerosóly (Zhang a kol., 2001). Stručne, v oboch prípadoch je suchá depozícia uvažovaná ako mechanizmus odstraňovania chemických látok 1. rádu, čo znamená, že tok chemickej látky k zemskému povrchu je počítaný ako súčin rýchlosti depozície chemickej látky a jej koncentrácie v prízemnej vrstve (REH (2018)). Odlišnosť suchej depozície medzi plynmi a aerosólmi spočíva v rozdielnej formulácii rýchlosti depozície, v_d , ktorá je dôsledkom odlišných mechanizmov uplatňujúcich sa pri nej, konkrétne:

- pri plynoch je počítaná, podľa vzťahu:

$$v_d = \frac{1}{R_a + R_b + R_c}, \quad (4.6)$$

kde: R_a je aerodynamický odpor popisujúci transport plynu vyvolaný vertikálnou turbulentnou difúziou (ten je závislý od intenzity turbulencie, ktorá sama o sebe závisí od: insolácie, rýchlosti prúdenia, drsnosti zemského povrchu a vertikálneho gradientu teploty v blízkosti zemského povrchu); R_b je odpor popisujúci transport plynu vyvolaný molekulárnou difúziou v tenkej kvázilaminárnej vrstve, ktorá vzniká nad povrchom prekážok (nad vrstvou prírodného či antropogénneho pokryvu zemského povrchu, baldachýnu) pri ich obtekaní (ten sa uvažuje, že pri danej frikčnej rýchlosti závisí iba od molekulárnej difuzivity daného plynu, resp. od Schmidtovho čísla, ktoré je definované ako podiel kinematickej viskozity vzduchu a molekulárnej difuzivity tohto plynu) a R_c je celkový odpor baldachýnu, v ktorom sú zahrnuté príspevky ako stomatálnej a mezofilnej rezistancie*, tak aj nestomatálnych rezistancií, ktorými sú: aerodynamická rezistencia v baldachýne (tá je považovaná za rovnakú pre všetky plyny a závisí od frikčnej rýchlosti a indexu listovej plochy, ktorý je definovaný ako podiel veľkosti plochy pokrytej listami rastlín k veľkosti ploche pôdorysu, na ktorej je tento index konštruovaný), prízemná a kutikulárna rezistencia, pričom obe sú závislé od typu plynu (v modeli sú počítané pre ozón a oxid siričitý, pre ostatné plyny sú škálované na základe rezistancií týchto dvoch

*Stomatálny odpor súvisí s depozíciou plynov do listov rastlín skrz póry (stomata), mezofilný odpor s depozíciou plynov do mezofilu (vnútornej časti listov obsahujúcej chloroplasty). Stomatálny odpor je pritom počítaný ako prevrátená hodnota súčinu: stomatálnej vodivosti (tá je funkciou intenzity žiarenia aktivujúceho fotosyntézu) a 3 funkcií redukujúcich túto vodivosť v závislosti od: teploty vzduchu, deficitu tlaku vodnej pary a od tzv. vodného potenciálu listov (Zhang a kol., 2003).

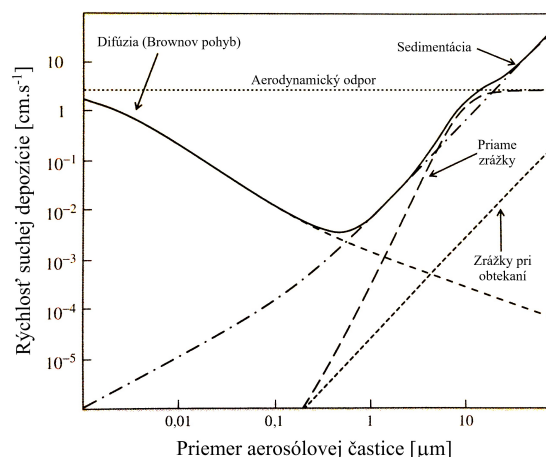
plynov) (Zhang a kol., 2003). Prízemná rezistancia je pritom počítaná v závislosti od typu zemského povrchu, a to konkrétne pre: vodný, snehový, ľadový alebo pôdny pokryv, pričom pri poslednom z nich je taktiež započítaný vplyv vlhosti pôdy. Kutikulárna rezistancia (súvisiaca s depozíciou plynu na kutikule, t. j. vrchnej, ochrannej vrstve listov rastlín) je počítaná zvlášť pri suchých a vlhkých podmienkach, pričom je opäť závislá od frikčnej rýchlosti a indexu listovej plochy (v prípade vlhkých podmienok i od relatívnej vlhosti vzduchu);

- pri aerosóloch je počítaná, podľa vzťahu:

$$v_d = \frac{\rho d_p^2 g}{18\eta} \left[1 + \frac{2\xi}{d_p} \left(1,257 + 0,4e^{-0,55\frac{d_p}{\xi}} \right) \right] + \frac{1}{R_a + R_s}, \quad (4.7)$$

kde: d_p je priemer aerosólových častíc, g je gravitačné zrýchlenie, η je dynamická viskozita vzduchu, ξ je stredná voľná dráha molekúl vzduchu (tá je závislá od teploty a od kinematickej viskozity vzduchu), R_a je aerodynamická rezistancia a R_s je povrchová rezistancia. Prvý člen rovnice, ktorý v prípade plynov vôbec nefiguruje, popisuje depozíciu aerosólových častíc na zemský povrch gravitačným usadzovaním (sedimentáciou) so zahrnutím Cunninghamovej korekcie (výraz v hranatých zátvorkách), ktorá zohľadňuje sedimentáciu drobného aerosólu (Seigneur, 2019). Aerodynamická rezistancia nad baldachýnom, R_a , popisuje (analogicky ako v prípade plynov) transport aerosólových častíc vyvolaný vertikálnou turbulentnou difúziou, ktorá je (rovnako ako pri plynov) závislá od intenzity turbulencie. V schéme navrhutej Zhangom a kol. (Zhang a kol., 2001) je povrchová rezistancia, R_s , závislá od účinností zberu aerosólových častíc povrchom v dôsledku: difúzie (Brownovho pohybu, pri ktorom účinnosť závisí od veľkosti Schmidtovej čísla); priamych zrážok (parametrizovaných pomocou rôznych funkčných závislostí Stokesovho čísla v závislosti od typu povrchu, na ktorom k suchej depozícii dochádza); zrážok častíc obtekajúcich povrch po prúdnicach s polomerom zakrivenia menším než je ich geometrický priemer (tento proces je významný najmä pri väčších aerosólových časticiach, pričom v tomto prípade je účinnosť parametrizovaná pomocou tzv. charakteristického polomeru, ktorý je závislý od typu povrchu a sezónnych kategórií). Jednotlivé mechanizmy suchej depozície sú prirodzene závislé od veľkosti aerosólových častíc (s výnimkou aerodynamického odporu, ktorý je ovplyvňovaný meteorologickými podmienkami), čo je ilustračne demonštrované na obr. 4.2. Ako je z neho evidentné, pri malých časticiach je dominantným depozičným mechanizmom difúzia, s rastúcim priemerom aerosólových častíc narastá vplyv sedimentácie, priamych zrážok a zrážok väčších častíc pri obtekaní povrchu v jeho blízkosti.

- jej emisie (6. člen), ktorá je do modelu zahrnutá dvojakým spôsobom, a to pomocou:
 - plošnej emisie, ktorá reprezentuje zdroje emitujúce chemickú látku v blízkosti zemského povrchu, pričom tá v dôsledku slabého vztľaku



Obrázok 4.2: Ilustrácia závislosti príspevkov mechanizmov suchej depozície k jej celkovej rýchlosti od priemeru aerosólových častíc. Obrázok bol prevzatý a upravený zo Seigneurovej knihy (Seigneur, 2019).

nedosahuje do vyšších hladín modelu (napr. z mobilných zdrojov, ako sú automobily, z biogénnych zdrojov a ďalších) – takáto emisia je vstrekovaná do najnižšie ležiacich sieťových buniek v každom kroku časovej integrácie modelu (jedná sa teda o dvojdimenzionálne polia emisií);

- bodových emisií, reprezentujúcich emisie chemickej látky zo zdrojov nad zemským povrchom, ktoré v dôsledku väčšieho vztlaku môžu dosahovať do vyšších hladín modelu (napr. emisie z komínov v priemyselných oblastiach, ale i z prírodných zdrojov, ako napr. z bleskov) – tieto emisie sú v závislosti od výšky zdrojov vstrekované do sieťových buniek v príslušných vyšších hladinách v každom kroku časovej integrácie modelu (jedná sa teda o trojdimenzionálne polia emisií);
- mokrej depozície (7. člen), ktorá je hlavným procesom odstraňovania častíc jemnej frakcie aerosólov a taktiež môže byť dôležitým procesom odstraňovania dobre rozpustných plynov vo vode (t. j. plynov s vysokou hodnotou Henryovej konštanty, ako napr. H_2O_2 či HNO_3) – tá je počítaná v každom stĺpci modelu, kde dochádza ku zrážkam, ktoré dosahujú až na zemský povrch (pričom jej výpočet prebieha logicky v stĺpcoch smerom nadol), a to vychádzajúc z teórie mokrej depozície podľa Seinfelda a Pandisa (Seinfeld a Pandis, 1998). Stručne, v tejto teórii je rozlíšené mokré vymývanie aerosólov a plynov, pričom:
 - pri aerosóloch závisí vymývanie od rýchlosti rastu oblačných kvapôčiek vody, resp. ľadových kryštálikov obsahujúcich aerosólove častice (tie boli pri výpočtoch v práci zahrnuté 2 monodisperznými distribúciami častíc: jednou pre jemnú frakciu aerosólu, druhou pre frakciu hrubého aerosólu) na hydrometeory* a od rýchlosti zberu aerosólových častíc

*Hydrometeory sú v modeli reprezentované monodisperznými distribúciami troch typov, a to dažďových kvapiek, snehových vločiek a krúp (z posledných dvoch typov pritom môže v oblačnej vrstve existovať len jeden z nich), t. j. všetky častice príslušného typu sú rovnaké, pričom sú charakterizované priemernou veľkosťou, hmotnosťou a pádovou rýchlosťou pozdĺž stĺpcov modelu, ktoré sú určené z ekvivalentnej intenzity zrážok na zemskom povrchu pomocou

do zrážok, ku ktorému dochádza pri páde hydrometeorov pod oblačnosťou, pričom koeficient mokrého vymývania, Λ_i , je v tomto prípade počítaný pomocou vzťahu:

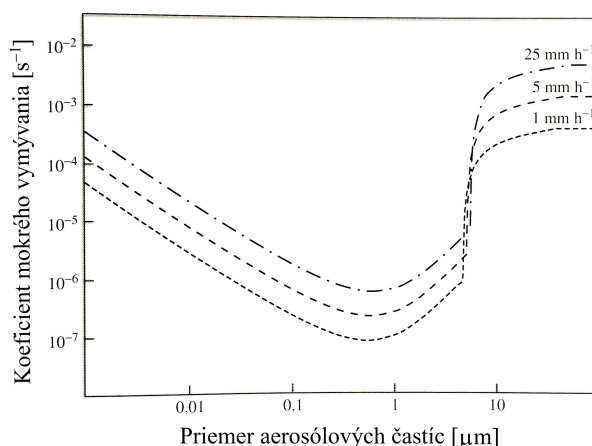
$$\Lambda_i = 4,2 \times 10^{-7} \frac{PE}{d_d}, \quad (4.8)$$

kde P je intenzita zrážok, E popisuje účinnosť zberu aerosólových častíc (pričom v oblačných vrstvách je jej hodnota rovná 0,9, vo vrstvách pod oblačnosťou je vyjadrená pomerne zložitou funkciou, ktorá závisí od: hustoty a priemeru aerosólových častíc, priemeru a pádovej rýchlosti hydrometeorov a kinematickej viskozity vzduchu a vody (Seinfeld a Pandis, 1998; Seigneur, 2019)) a d_d je priemerný priemer dažďových kvapiek. Pre predstavu sú na obr. 4.3 ilustračne zobrazené závislosti Λ_i pre vymývanie dažďovými kvapkami od priemeru aerosólových častíc pri rôzne veľkej intenzite zrážok.

- pri plynch závisí vymývanie prirodzene taktiež od rýchlosti rastu oblačných kvapôčiek vody, resp. ľadových kryštálikov obsahujúcich daný plyn na hydrometeory a od rýchlosti difúzie plynov do zrážok, ku ktorej dochádza ako v oblačnosti (množstvo plynu rozpusteného v oblačnej vode je počítané na základe rovnováhy s koncentráciou plynu v jej okolí, a to na základe Henryho zákona rozpustnosti a disociačnej rovnováhy, ktorá závisí od teploty a kyslosti oblačnej vody), tak pri páde hydrometeorov pod oblačnosťou – koeficient mokrého vymývania, Λ_i , je v tomto prípade počítaný pomocou vzťahu:

$$\Lambda_i = 1,67 \times 10^{-6} \frac{PK_c}{d_d v_d}, \quad (4.9)$$

parametrizácií (tie je možné nájsť v manuáli citovanom v úvode tejto podkapitoly).



Obrázok 4.3: Ilustrácia závislostí koeficientu mokrého vymývania aerosólových častíc dažďovými kvapkami od priemeru aerosólových častíc a od intenzity zrážok, konkrétne teda pri intenzite zrážok: $1 \text{ mm} \cdot \text{h}^{-1}$ (jemne čiarkovaná čiara), $5 \text{ mm} \cdot \text{h}^{-1}$ (čiarkovaná čiara) a $25 \text{ mm} \cdot \text{h}^{-1}$ (bodkočiarkovaná čiara). Obrázok bol prevzatý a upravený zo Seigneurovej knihy, viď Seigneur (2019).

kde: P a d_d majú rovnaký význam ako v rovnici 4.8, v_d je pádová rýchlosť hydrometeorov a K_c je koeficient transportu hmoty, ktorý je daný vzťahom:

$$K_c = \frac{D_g}{d_d} \left[2 + 0,6 \left(\frac{d_d v_d}{\nu} \right)^{1/2} \left(\frac{\nu}{D_g} \right)^{1/3} \right], \quad (4.10)$$

kde: ν , resp. D_g je molekulárna difuzivita vzduchu, resp. príslušného plynu a význam ostatných veličín je rovnaký ako v rovnici vyššie. V modeli je taktiež zohľadnené vymývanie plynov difúziou do hydrometeorov v sieťových bunkách, do ktorých hydrometeory vstupujú s koncentráciou rozpusteného plynu, ktorá odpovedá presýtenému stavu plynom voči okolitej koncentrácii plynu v bunkách.

- chemizmu (8. člen), ktorý je počítaný simultánne s transportom, a to riešením sústav obyčajných diferenciálnych rovníc, ktoré závisia od použitých chemických mechanizmov pri simulácii (podrobnejšie popísaných v nasledujúcej podkapitole).

Numericky je riešenie rovnice kontinuity realizované sériou po sebe nasledujúcich krokov, kde v prvom kroku sú do sieťových buniek vstreknuté emisie zo všetkých zdrojov, následne je počítaná horizontálna a vertikálna advekcia, potom vertikálna turbulentná difúzia so zahrnutím suchej depozície, po nej horizontálna turbulentná difúzia, následne chemizmus a nakoniec mokrá depozícia, pričom dĺžka integračného kroku je v modeli určovaná dynamicky v priebehu simulácie.

Značná flexibilita modelu pri transformácii vstupných polí meteorologických prvkov a emisií chemických látok (zaručená 4 typmi karteziánskych kartografických projekcií: Lambertovou kuželovou, polárnou stereografickou, Mercatorovou a všeobecnou Mercatorovou, ako aj možnosť výpočtu priamo v zakrivenom geografickom systéme súradníc) umožňuje nastavenie siete gridových bodov v horizontálnych rovinách požadovaných vlastností. Súčasne, vertikálna štruktúra vrstiev je do modelu špecifikovaná externe (o čom je podrobnejšie popísané v stati 4.2.2), čím je umožnené ľubovoľné zadanie výšiek vrstiev v priestore a v čase. Obe tieto vlastnosti modelu tak umožňujú nastaviť identickú štruktúru siete v jednotlivých krokoch integrácie modelu, aká bola získaná pri simuláciách modelom RegCM 4.6.

Na záver k popisu siete modelu je vhodné dodať, že model umožňuje simultánne riešiť transport a chemizmus vo vybraných oblastiach záujmu základnej siete vo vnorených sieťach (prítom v modeli je možné dvojstupňové vnorenie) s vyšším priestorovým rozlíšením. Táto možnosť vnorenia sietí pri simuláciách v práci nebola použitá.

4.1.2 Chemické mechanizmy

Do modelu CAMx 6.50 je zabudované celé spektrum rôznych chemických mechanizmov, pomocou ktorých je riešená ako chémia v plynnej fáze, tak chémia aerosólov. Ich podrobný prehľad je prítom možné nájsť v manuáli zmienenom na začiatku tejto kapitoly. Pri simuláciách realizovaných v práci boli použité nasledujúce z nich:

- Carbon Bond Mechanism: CB05 – riadi chémiu plynnej fázy (Yarwood a kol., 2005),
- ISORROPIA – riadi chémiu a prerozdelenie anorganických aerosólov (Nenes a kol., 1998),
- SOAP 2.1 – riadi chémiu a prerozdelenie sekundárnych organických aerosólov (SOA) Strader a kol. (1999),

a to v prepojení chemizmu plynnej fázy s chemizmom aerosólov pomocou CF modulu (skratka z anglického názvu pre *Coarse/Fine Module*), ktorý prerozdeľuje distribúcie primárnych aerosólových častíc do 2 statických módov, a to na jemnú a hrubú frakciu, kým všetky sekundárne aerosólové častice sú modelované iba ako častice jemnej frakcie (REH (2018)).

Mechanizmus CB05

Mechanizmus CB05 rieši chemizmus 51 chemických entít, uvedených v tab. 6.1. Ako je z nej evidentné, v modeli sú niektoré plyny, resp. radikály uvažované explicitne, napríklad: NO, NO₂, NO₃, N₂O₅, O₃, OH, HO₂, (¹D)O, (³P)O, CO, CH₄, C₂H₆, C₂H₄, CH₃OH, CH₃CH₂OH, HCHO, CH₃CHO, ostatné sú zahrnuté do skupín plynov, resp. radikálov podobných chemických vlastností, resp. sú uvažované koncentrácie častí väčších organických plynov s rôznym usporiadaním násobných väzieb. Takýto spôsob delenia chemických látok je použitý aj v ostatných mechanizmoch plynnej fázy dostupných v modeli. V mechanizme je zabudovaných celkom 156 reakcií, presnejšie teda v jeho základnej verzii, ktorá bola v práci použitá. Informácie o dodatočnom rozšírení o chemizmus zlúčenín chlóru je možné nájsť v práci Yarwooda a kol. (Yarwood a kol., 2005). Okrem reakcie 1.7 sú do CB05 zabudované všetky reakcie uvedené v podkapitolách 1.2.1 až 1.2.3. Prehľad zvyšných reakcií je uvedený v tab. 6.2 až 6.5. Z nich je vidieť, že do mechanizmu sú na pomerne pokročilej úrovni zahrnuté fotochemické reakcie riadiace chemizmus anorganických i organických plynov akov denných, tak i v nočných hodinách. Súčasne, zo zväjomného previazania reakcií je evidentná značná komplexnosť chemizmu plynov, o ktorej bolo pojednané v podkapitole 1.2.

Z matematického hľadiska (ako už bolo zmienené v podkapitole 1.2.2) sú mechanizmy chémie plynnej fázy reprezentované sústavou obyčajných diferenciálnych rovníc so silným tlmením. Numerická integrácia mechanizmu chémie plynnej fázy tak predstavuje jednu z časovo najnáročnejších operácií v priebehu integrácie CHTM (REH (2018)). K numerickému riešeniu CB05 bola v práci použitá metóda EBI (skratka z anglického názvu *Euler Backward Iteration method*), vytvorená Hertelom a kol. (Hertel a kol., 1993). Stručne, sústavu obyčajných diferenciálnych rovníc popisujúcich kinetiku chemizmu je možné vyjadriť v tvare:

$$\frac{dc_i}{dt} = P_i - L_i c_i, \quad \text{pre: } i = 1, \dots, nc; \quad (4.11)$$

kde: c_i je koncentrácia i -tej chemickej látky; P_i , resp. L_i vyjadruje produkciu, resp. prepád i -tej chemickej látky (obe sú všeobecne funkciami koncentrácie iných látok); nc je počet chemických látok a d/dt je operátor úplnej časovej derivácie.

Pretože mechanizmus obsahuje rovnice vyšších rádov než 1., je táto sústava navyše nelineárna. Metóda EBI je založená na iteračnom riešení lineárnej sústavy rovníc (vdaka tomu je pri ňom presne splnený zákon zachovania hmotnosti chemických látok) reprezentujúcej spätnú (implicitnú) Eulerovu aproximáciu rovníc 4.13, ktorú je možné vyjadriť v tvare:

$$c_i^{n+1} = \frac{c_i^n + P_i^{n+1} \Delta t}{1 + L_i^{n+1} \Delta t}, \quad \text{pre: } i = 1, \dots, nc; \quad (4.12)$$

kde: horné indexy $n, n + 1$ pri veličinách označujú iteračné kroky a Δt je časový krok iterácie. Koncentrácie niektorých vzájomne úzko chemicky spätých látok v mechanizme sú pritom počítané explicitne, čo prirodzene redukuje počet rovníc v sústave, a tak urýchluje samotný výpočet mechanizmu.

Mechanizmus ISORROPIA

ISORROPIA, ako už bolo zmienené, predstavuje mechanizmus riadiaci chémiu a prerozdeľovanie anorganických aerosólov. Do mechanizmu je zabudovaných celkovo 23 chemických entít v troch termodynamických fázach, konkrétne:

- amoniak (NH_3), kyselina dusičná (HNO_3), vodná para (H_2O), chlór vodík (HCl) vo fáze plynnej;
- amónny katión (NH_4^+), sodný katión (Na^+), vodíkový katión (H^+), chloridový anión (Cl^-), dusičnanový anión (NO_3^-), sírannový anión (SO_4^{2-}), hydrogensíranový anión (HSO_4^-), hydroxidový anión (OH^-), voda (H_2O) vo fáze kvapalnej, resp. vo fáze vodného roztoku;
- hydrogensíran amónny (NH_4HSO_4), síran amónny ($(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$), dusičnan amónny (NH_4NO_3), chlorid amónny (NH_4Cl), disíran hydrogentriamónny, letovicit ($(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SO}_4)_2$), chlorid sodný (NaCl), dusičnan sodný (NaNO_3), hydrogensíran sodný (NaHSO_4), síran sodný (Na_2SO_4) a kyselina sírová (H_2SO_4) vo fáze pevnej,

ktoré sú vzájomne previazané 15 reverzibilnými reakciami, uvedenými v tab 6.6. Existencia jednotlivých chemických látok je pritom riadená jedným zo 4 režimov, a to v závislosti od hodnôt tzv. síranového a sodíkového pomeru (ich definície, spolu s podrobným popisom jednotlivých režimov a chemickými látkami, ktoré v nich figurujú je možné nájsť vo vyššie zmienenom článku).

Výpočet zastúpenia jednotlivých chemických entít vychádza z predpokladu platnosti termodynamickej rovnováhy medzi nimi, ku ktorej (ako je taktiež uvedené v zmienenej práci) dochádza v uzatvorenom termodynamickom systéme pri konštantnej teplote T a tlaku p v okamihu, kedy voľná energia systému, G , dosiahne svojho minima, čo je možné matematicky vyjadriť podmienkami:

$$\sum_i \nu_{ij} \mu_i = 0, \quad \text{pre všetky reakcie } j, \quad (4.13)$$

kde: ν_{ij} je stechiometrický koeficient i -tej chemickej látky v j -tej reakcii a μ_i je chemický potenciál i -tej chemickej látky, pre ktorý platí:

$$\mu_i = \mu_i^0(T) + RT \ln a_i, \quad (4.14)$$

kde: $\mu_i^0(T)$ je štandardný chemický potenciál i -tej chemickej látky pri teplote T a tlaku rovnom 1 atmosfére, R je univerzálna plynová konštanta, T je termodynamická teplota, \ln je prirodzený logaritmus a a_i je aktivita i -tej chemickej látky, ktorá je pre:

- pevné látky rovná 1;
- ideálne plyny rovná parciálnemu tlaku i -teho plynu;
- vodné roztoky elektrolytov rovná:

$$a_i = \gamma_i^{(\nu_+ + \nu_-)} m_+^{\nu_+} m_-^{\nu_-}, \quad (4.15)$$

kde: γ_i je koeficient aktivity i -tej chemickej látky (tie sú počítané pomocou empirických, resp. semiempirických vzťahov, napr. pomocou Bromleyovho vzťahu (Nenes a kol., 1998)); ν_+ , resp. ν_- je látkové množstvo katiónov, resp. aniónov, ktoré sa uvoľní pri rozustení 1 molu i -tej chemickej látky a m_+ , resp. m_- je molalita (látková koncentrácia) katiónov, resp. aniónov.

Sústavu rovníc určujúcu koncentrácie všetkých chemických látok prítomných v uvažovanom systéme je možné vyjadriť (dosadením rovnice 4.14 do rovnice 4.13 a následnou algebraickou úpravou) v tvare:

$$\prod_i a_i^{\nu_{ij}} = \exp\left(-\frac{\sum_i \nu_{ij} \mu_i^0(T)}{RT}\right) \quad \text{pre všetky reakcie } j, \quad (4.16)$$

pričom výrazy na pravých stranách tejto sústavy rovníc (kde \exp označuje exponenciálnu funkciu) reprezentujú rovnovážne konštanty, $K_j(T)$, j -tej reakcie (závislé od termodynamической teploty T), ktoré sú v mechanizme určované riešením Van't Hoffovej rovnice:

$$\frac{d \ln K_j(T)}{dT} = \frac{\Delta H_j^0(T)}{RT^2}, \quad (4.17)$$

kde: $\Delta H_j^0(T)$ je zmena štandardnej entalpie v priebehu j -tej reakcie pri teplote T , d/dT je operátor totálnej derivácie podľa T a význam ostatných veličín, resp. funkcie je rovnaký ako v rovnici 4.14.

V mechanizme je pri fázových prechodoch medzi fázou vodného roztoku a pevnou fázou aerosólov braný do úvahy koncept $MDRH^*$, ktorý taktiež popísali Nenes a kol. (1998). Stručne, je známe, že hydrofilné aerosóly v pevnej fáze prechádzajú pri istej hodnote relatívnej vlhkosti vzduchu, DRH , (závislej od ich chemického zloženia a od termodynamической teploty) do fázy vodného roztoku. Súčasne, ako teoreticky, tak aj experimentálne bolo dokázané, že v prípade zmesi viacerých druhov aerosólových častíc dochádza k ich rozpusteniu pri relatívnej vlhkosti vzduchu (závisiacej opäť od termodynamической teploty), ktorá je menšia ako najnižšia hodnota DHR jednotlivých aerosólov tvoriarich zmes a navyše, jej hodnota je závislá od relatívneho zastúpenia jednotlivých druhov aerosólov v zmesi. Minimálna hodnota relatívnej vlhkosti, ktorú môže pri určitej termodynamической teplote dosiahnuť pre určitú zmes aerosólov (t. j. pri ich konkrétnom

* $MDRH$, resp. DRH je skratka anglického termínu *Mutual Deliquescence Relative Humidity*, resp. *Deliquescence Relative Humidity* Nenes a kol. (1998).

relatívnom zastúpení aerosólov v zmesi) sa označuje práve ako *MDRH*. Pri nej je vodná fáza systému nasýtená všetkými aerosólmi prítomnými v zmesi. Neuváženie oblasti definovanej podmienkou:

$$MDRH(X_1, X_2, \dots, X_n) \leq r < \min\{DRH(X_1), DRH(X_2), \dots, DRH(X_n)\},$$

kde: X_1 až X_n označujú aerosóly zmesi, r je relatívna vlhkosť vzduchu, $DRH(X_1)$ až $DRH(X_n)$ označujú relatívne vlhkosť, pri ktorých dochádza k rozpusteniu jednotlivých aerosólov zmesi a \min označuje funkciu vyberajúcu minimálnu hodnotu zo súboru hodnôt; by tak viedlo k chybnému určeniu aerosólov v pevnej fáze v tejto oblasti relatívnej vlhkosť vzduchu, čo môže potenciálne ovplyvňovať predpokladaný priamy i nepriamy mechanizmus pôsobenia aerosólov na klimatický systém (keďže prítomnosť vodného roztoku aerosólov ovplyvňuje prerozdelenie koncentrácie prchavých látok ako aj veľkostí aerosólových častíc).

Mechanizmus SOAP 2.1

SOAP 2.1, ako už bolo zmienené, predstavuje mechanizmus riadiaci chémiu a prerozdelenie sekundárnych organických aerosólov (SOA). Tento mechanizmus sa skladá z dvoch komponentov, kde: prvý riadi oxidáciu plynnej fáze ROL, pri ktorej vznikajú plyny schopné kondenzácie, CGs (skratka z anglického termínu *condensable gasses*), druhý riadi prerozdelenie (opäť na základe predpokladu termodynamickú rovnováhy) medzi plynnou fázou CGs a fázou sekundárneho organického aerosólu (SOA) pre každý pár CGs–SOA (Strader a kol., 1999). Schématicky je teda možné popísať mechanizmus SOAP 2.1 následne:



Prekursori CGs z antropogénnych zdrojov sú v SOAP 2.1 uvažované: benzén, toluén, xylén a SVOCs, prekursori CGs z biogénnych zdrojov sú uvažované: izoprén, monoterpény a seskviterpény. Každý prekursor pritom vytvára tri typy CGs, a to: s väčšou, s menšou a so žiadnou prchavosťou. Koncentrácie SOA sú preto v modeli rozdelené do celkovo 6 kategórií, a to na: SOA1, SOA2 a SOPA, resp. SOA3, SOA4 a SOPB, ktoré reprezentujú koncentrácie SOA vznikajúcich z CGs s väčšou, s menšou a so žiadnou prchavosťou zo všetkých antropogénnych, resp. zo všetkých biogénnych prekursorov.

V mechanizme je taktiež uvažovaný úbytok SOA fotolýzou, ktorý je implementovaný ako reakcia 1. poriadku, kde rýchlosť fotolýzy SOA, J_{SOA} , je braná ako preškálovaná rýchlosť fotolýzy oxidu dusičitého, J_{NO_2} , konkrétne 0,4 % z jeho hodnoty (REH (2018)). Rýchlosť úbytku koncentrácie SOA, $[SOA]$, je tak počítaná diferenciálnou rovnicou:

$$\frac{d[SOA]}{dt} = -4 \times 10^{-3} J_{NO_2} [SOA]. \quad (4.19)$$

Okrem toho je v mechanizme taktiež braná do úvahy polymerizácia antropogénnych SOA, ktorou vznikajú SOPA. Celkovo je tak koncentrácia SOA daná súčtom: SOA1 až SOA4, SOPA a SOPB. Celkový organický aerosól je daný súčtom SOA a jednotlivých druhov primárnych organických aerosólov (POA, ich celková koncentrácia je v mechanizme rovnako označená ako POA), ktoré nie sú mechanizmom chemicky ovplyvňované, no zmeny koncentrácie SOA sú od nich závislé.

4.2 *Offline* prepojenie CAMx 6.50 s RegCM 4.6 pomocou RegCM2CAMx

4.2.1 Poznámka o všeobecných spôsoboch prepojenia modelov

Všeobecné spôsoby prepojenia dvoch modelov, resp. modulov (submodelov) v modeli (označených napr. ako \mathbf{X} a \mathbf{Y}) medzi sebou popísal napr. Huszár (2011). Stručne ich možno zhrnúť nasledovne:

- o dvoch (sub)modeloch \mathbf{X} , resp. \mathbf{Y} sa hovorí ako o tesne (silno) prepojených v prípade, kedy jeden (sub)model (napr. \mathbf{Y}) priamo závisí od vnútornej štruktúry (sub)modelu druhého (napr. \mathbf{X}), a teda od spôsobu, akým ten realizuje výpočet (napr. prostredníctvom prístupu k miestnym dátam tohto (sub)modelu), čo znamená, že prípadné zmeny spôsobu realizácie dát v (sub)modeli \mathbf{X} sa taktiež prejavujú v zmenách dát produkovaných (sub)modelom na ňom závislom, teda (sub)modulom \mathbf{Y} ;
- o dvoch (sub)modeloch \mathbf{X} , resp. \mathbf{Y} sa hovorí ako o voľne (slabo) prepojených v prípade, keď sú oba (sub)modely prepojené vzájomným (stabilným) rozhraním, a teda takýto mechanizmus prepojenia nezávisí od vnútornej štruktúry (sub)modelov.

Dva modely, resp. submodely v rámci zložitejšieho modelu môžu byť logicky prepojené dvomi spôsobmi: jednosmerne alebo obojsmerne, pričom takéto prepojenie môže byť realizované tesne alebo voľne. Napríklad, ako bolo zmienené v podkapitole 3.1, DD klimatického systému sa v súčasnosti realizuje dvojakým spôsobom, a to:

- buď jednosmerným prepojením výstupov z GCMs (resp. z nich získaných reanalýz) do RCMs – v tomto prípade polia meteorologických prvkov určených z GCMs nie sú ovplyvnené dynamikou v RCMs;
- alebo obojsmerným prepojením vo VRGCMs, kde existuje(ú) vzájomná(é) obojstranná(é) väzba(y) medzi simuláciou(iami) s nižším a s vyšším(i) rozlíšením(iami).

Pri prepojení CHTM s modelmi klimatickými sa v prípade ich voľného (slabého) prepojenia hovorí aj o tzv. *offline* prepojení, v prípade ich tesného (silného) prepojenia sa hovorí o tzv. *online* prepojení (Huszár, 2011). Pretože *online* prepojenie modelov RegCM a CAMx nebolo v rámci diplomovej práce realizované, nebude ani ďalej podrobnejšie popísané. Details o ňom je možné nájsť napr. v prácach Huszára a kol. (Huszár a kol., 2012, 2016b).

4.2.2 Popis a funkcia RegCM2CAMx

Ako bolo popísané v podkapitole 4.1, v modeli CAMx 6.50 sa k výpočtu časovej derivácie koncentrácie chemických látok (a teda aj k ich časovému vývoju) používa Eulerova rovnica, ktorá okrem nej obsahuje ďalších 8 členov popisujúcich dlhšie časové zmeny vyvolané napr. advekciou, turbulenciou či depozíciou.

Tieto procesy (ako bolo taktiež poukázané vo vyššie zmienenej podkapitole) sú závislé od meteorologických podmienok (napr. od teploty vzduchu, rýchlosti vetra či množstva zrážok), ktoré je do modelu nutné dodať ako vonkajší časovo závislý dátový zdroj. Takýmto dátam sa často hovorí aj riadiace meteorologické dáta (polia), a to práve kvôli ich úlohe riadenia celej rady procesov závislých na okamžitom fyzikálnom stave atmosféry.

Do CAMx 6.50 sú riadiace meteorologické polia dodávané formou 4 vstupných súborov (pričom sa väčšinou jedná o hodinové dáta dodávané pre každý deň simulácie zvlášť), kde:

- prvý súbor obsahuje dáta o povrchovej teplote vzduchu, T_{2m} , prípadne o množstve snehovej pokrievky;
- druhý súbor obsahuje údaje o geopotenciálnej výške, z , o tlaku vzduchu, p , a o horizontálnych zložkách rýchlosti vetra, u , resp. v , v jednotlivých modelových hladinách a tiež o teplote vzduchu, T , v jednotlivých modelových medzihladinách – tento súbor tak jednoznačne určuje vertikálne členenie atmosféry, ktoré môže byť tým pádom závislé od času;
- tretí súbor obsahuje dáta o zmiešavacom pomere vodnej pary, q_v , o vodných obsahoch oblačnej vody, q_c , zrážkovej vody, q_r , vody obsiahnutej v padajúcom snehu, q_s , resp. vody v snehových krúpkach a v krúpkach, q_g , a taktiež o optickej hrúbke oblačnosti v jednotlivých modelových hladinách;
- posledný, štvrtý súbor poskytuje informácie o vertikálnej turbulencii, obsahuje teda koeficienty vertikálnej turbulentnej difúzie, K_v , v každej modelovej hladine.

Všeobecne, údaje o týchto priestorovo a časovo závislých fyzikálnych veličinách sú väčšinou získané z tzv. riadiaceho modelu, ktorým môže byť NWP model, resp. LAM (napr. model ALADIN používaný Českým hydrometeorologickým ústavom alebo model WRF), poprípade niektorý z GCMs, resp. z RCMs. Prevod meteorologických výstupov riadiaceho modelu na vstupy do modelu CAMx (v príslušných formátoch modelom akceptovaných) pritom zaisťujú tzv. meteorologické preprocesory, ktoré sú jeho súčasťou. Tu je však nutné podotknúť, že meteorologický preprocesor pre výstupy z modelu RegCM nebol a dodnes v modeli CAMx zabudovaný nie je. Avšak, v rámci svojej dizertačnej práce Huszár (2011) takýto preprocesor (označený ako RegCM2CAMx) vytvoril, a to z meteorologického preprocesoru WRFCAMx (slúžiaceho k prevodu výstupov z modelu WRF do CAMx). Pôvodný preprocesor od tej doby prešiel ďalším vývojom, ktorý je postupne popísaný v prácach Huszára a kol. (Huszár a kol., 2016a,b, 2018a,b, 2020). Pretože RegCM2CAMx je kľúčovým elementom pri realizácii simulácií v diplomovej práci, zaslúži si podrobnejší popis.

Úlohou RegCM2CAMx je poskytnúť, poprípade diagnosticky vytvoriť vstupné dáta nutné pre simuláciu modelom CAMx, a to z výstupných dát modelu RegCM. V tejto súvislosti je vhodné upozorniť na skutočnosť, že RegCM 4.6 vo výstupných súboroch simulácií poskytuje polia rozdielných meteorologických prvkov, a to

v závislosti od typov parametrizácií fyzikálnych procesov pri nich použitých, pričom polia T_{2m} , T , u a v poskytuje priamo na výstupoch pri použití ktorejkoľvek z jeho možných konfigurácií. Meteorologické polia niektorých z ostatných zmienených fyzikálnych veličín (napr. vodných obsahov či K_v) sú na výstupoch modelu dostupné len pri niektorých z jeho konfigurácií. Napríklad, pri použití ECMWF parametrizácie mikrofyziky stratiformnej oblačnosti (tá, ako už bolo zmienené, bola pri simuláciach v práci použitá) sú vodné obsahy q_v , q_c , q_r , q_s a q_g priamo poskytované modelom na jeho výstupoch. Ako ďalší príklad možno uviesť, že pri použití UW parametrizácie MVA sú koeficienty vertikálnej turbulentnej difúzie, K_v , taktiež priamo poskytované modelom na jeho výstupoch. Pri použití Holtslagovej parametrizácie MVA tomu tak nie je a K_v musia byť dopočítané diagnosticky. Pôvodný postup tohto výpočtu bol Huszárom a kol. (Huszar a kol., 2016a) v preprocesore nahradený postupom implementovaným v modeli CMAQ (Byun a Ching, 1999), ktorý vychádza z teórie podobnosti pre rôzne režimy stability v MVA (tie sú v CMAQ definované pomocou bezrozmerného pomeru výšky nad zemským povrchom a Moninovej-Obukhovovej dĺžky). Polia optickej hrúbky oblačnosti modelom taktiež nie sú poskytované, a tak sú preprocesorom aj ony diagnosticky dopočítané, a to z percentuálneho pokrytia oblačnosti v každej hladine zisteného vodného obsahu oblačnej vody (Huszár, 2011). Huszar a kol. (2020) ďalej rozšírili možnosti výpočtu polí K_v z výstupov modelu, a to pomocou ďalších 4 schém, ktoré však v práci neboli použité, a preto nie sú ďalej podrobnejšie popísané.

Všeobecne pri *offline* (jednosmernom) prepojení modelov nie sú brané do úvahy spätné väzby zmien koncentrácií a ďalších vlastností polutantov na riadiacu meteorológiu (t. j. polia vybraných meteorologických prvkov, ktoré simuláciu CHTM riadia ňou nie sú ovplyvnené). Tvorba simulácie CHTM v *offline* prepojení s riadiacim modelom sa realizuje tak, že ako prvá sa vytvorí požadovaná simulácia modelom riadiacim, potom sa preprocesorom z jej výstupov pripraví riadiace polia pre CHTM (prirodzene, okrem nich je nutné pripraviť taktiež ďalšie vstupy do CHTM, ako sú napr. emisie polutantov či počiatkové a okrajové podmienky) a napokon sa vytvorí samotná simulácia pomocou CHTM. Takto uvedeným postupom boli realizované aj všetky simulácie v diplomovej práci.

5. Simulácie klímy modelom RegCM 4.6

Prvá podkapitola tejto kapitoly je venovaná popisu zhotovenia testovacích simulácií pomocou regionálneho klimatického modelu RegCM 4.6. V podkapitole druhej sú validované vybrané klimatické prvky vypočítané z výstupov testovacích simulácií s ich ekvivalentmi, ktoré boli určené z pozorovaní. V poslednej, tretej podkapitole sú analyzované dopady zmien parametrizácií v testovacích simuláciách na zmeny vybraných klimatických prvkov, ktoré boli z ich výstupov vypočítané.

5.1 Zhotovenie testovacích simulácií

Ako bolo popísané v kapitole 3, k testovaniu dopadov zmien parametrizácií v simuláciách klímy boli vybrané 2 schémy MVA (Holtslagova a UW) a 2 schémy konvekcie (Grellova a Tiedkeho). Súčasne v nej boli popísané i parametrizácie, ktoré sú pre simuláciu klímy taktiež nevyhnutné, avšak boli použité bez zmeny vo všetkých testovacích simuláciách – jedná sa o NCAR CCM3 parametrizáciu radiácie, model zemského povrchu CLM4.5, ECMWF schému mikrofyziky stratiformnej oblačnosti a Zengovu schému interakcie oceánu s atmosférou. Celkovo boli zrealizované 4 simulácie, ktoré budú ďalej v práci označené ako: RegCM (PHA1), RegCM (PHA2), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA4). Okrem nemienciach sa parametrizácií boli v prvej z nich použité schémy UW a Tiedtkeho, v druhej Holtslagova a Tiedtkeho, v tretej UW a Grellova a v poslednej, štvrtej, Holtslagova a Grellova (pre lepšiu prehľadnosť sú nastavenia meniacich sa parametrizácií zhrnuté v tab. 5.1).

Simulácie boli zrealizované v dĺžke jedného kalendárneho roka (konkrétne pre rok 2007) pomocou MPI* konfigurácie modelu RegCM 4.6, ktorá umožňuje výpočet na paralelne prepojených výpočtových jednotkách. Konkrétne, výpočty prebiehali na klastri, ktorý sa skladá z 24 procesorov, na Katedre fyziky atmosféry Univerzity Karlovej v Prahe. Oblasť Zeme, na ktorej výpočty regionálnej klímy prebiehali, bola vytvorená preprocesorom `terrainCLM45` a centrovaná na Prahu (50° 5' severnej zemepisnej šírky, 14° 25' východnej zemepisnej dĺžky; z tohto dôvodu je označenie experimentov „PHAx“), pričom pokrýva, ako je vidieť na obr. 5.1 vľavo, väčšinu Európy a časti severnej Afriky, Atlantického oceánu a Prednej Ázie. V modeli je Lambertovou konformnou projekciou prevedená na sieť s horizontálnymi rozmermi 189 × 141 sieťových bodov, pričom veľkosť sieťových buniek je 27 × 27 km (vhodné je upozorniť na to, že v dôsledku použitého priestorového rozlíšenia sieťových buniek sú hornaté oblasti v modeli všeobecne podhodnotené, napríklad najvyššie položené oblasti Álp dosahujú nadmorské výšky prevyšujúce len 2800 m nad morom, a naopak pobrežné oblasti sú všeobecne viac rozprestrené do oceánu/morí). Vo vertikálnom smere boli simulácie realizované na 24 σ -hladinách a na k nim prislúchajúcich 23 polohladinách (vrstvách), pričom najnižšia, resp. najvyššia z nich reprezentovala zemský povrch, resp. izobarickú hla-

*MPI je skratkou anglického termínu *Message Passing Interface*, t. j. skratkou pre rozhranie na výmenu správ, ktoré umožňuje paralelný výpočet na viacerých výpočtových jednotkách.

Označenie simulácie	Parametrizácia	
	MVA	konvekcie
RegCM (PHA1)	UW	Tiedtkeho
RegCM (PHA2)	Holtslagova	Tiedtkeho
RegCM (PHA3)	UW	Grellova
RegCM (PHA4)	Holtslagova	Grellova

Tabuľka 5.1: Nastavenie parametrizácií v simuláciach modelom RegCM 4.6.

dinu s tlakom 50 hPa. Prehľad hodnôt σ použitých pre jednotlivé hladiny, resp. medzihladiny je uvedený v tab. 6.7 v tabuľkovej prílohe. Voľba roku (2007) a domény (veľkosť a rozlíšenie) vychádza zo štúdie Huszára a kol. (Huszar a kol., 2020).

Keďže výpočty simulácií boli riešené split-explicitnou metódou (popísanou v podkapitole 3.2.1), bolo nutné zvoliť dĺžku časového kroku integrácie – tá bola nastavená na 60 s, pričom všetky simulácie pri nej prebehli stabilne. Okrem nej bolo taktiež nutné nastaviť dĺžky časových intervalov, s ktorými sa do integrácie spúšťajú jednotlivé parametrizácie – tie boli ponechané na hodnotách, ktoré sú nastavené v základnej konfigurácii modelu*, t. j. 600 s pre model zemského povrchu, 30 min pre parametrizáciu radiácie, 18 h pre výpočty absorpcie/emisie a 60 s pre parametrizáciu konvekcie. Vo všetkých 4 simuláciách boli taktiež hodnoty všetkých parametrov v jednotlivých parametrizáciách ponechané na tých, ktoré sú nastavené vo vyššie zmienenej základnej konfigurácii modelu.

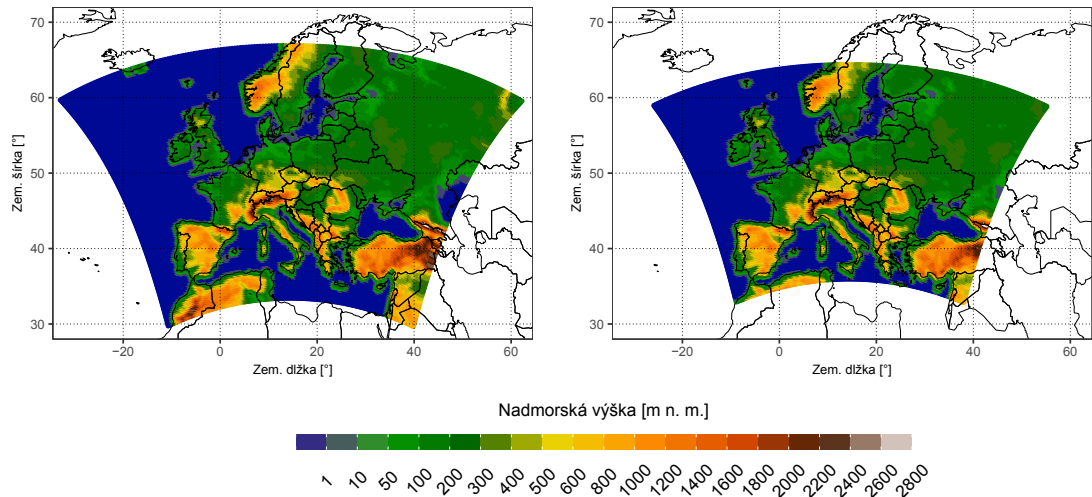
Nevyhnutnou súčasťou prípravy realizácie behov modelu RegCM 4.6 je vytvorenie počiatkovej podmienky a okrajových podmienok, ktoré sa v modeli konštruujú zvlášť pre SST a zvlášť pre stav atmosféry, a to pomocou preprocesorov `sstCLM45` a `icbcCLM45`. Pre všetky 4 simulácie boli zhotovené jedny podmienky ako pre SST, tak aj pre stav atmosféry, a to z reanalýzy ERA-Interim[†], pričom oba typy boli vytvorené s časovým intervalom 6 h (v behoch modelu sa menili vždy o 0, 6, 12 a 18 h UT) a do všetkých simulácií boli implementované pomocou relaxačno-difúznej techniky (popísanej v podkapitole 3.1) v puferovej oblasti, ktorá obsahovala 11 najbližších bodov siete k okraju študovanej oblasti (na obr. 5.1 vpravo je pre ilustráciu zobrazená v práci študovaná oblasť bez tejto puferovej oblasti).

Model bol pri jeho inštalácii nakonfigurovaný tak, aby dátové výstupy poskytoval vo formáte NetCDF-4[‡], pričom frekvencia výstupov fyzikálnych parametrov bola vo všetkých behoch modelu nastavená na 1 h.

*Podrobný popis jednotlivých parametrov tohto nastavenia modelu je možné nájsť v manuáli Giorgiho a kol. (Giorgi a kol., 2016).

[†]ERA-Interim predstavuje reanalýzu pokrývajúcu časové obdobie od roku 1979 do 31. 8. 2019 (údaj z internetovej stránky: <https://www.ecmwf.int/en/forecasts/datasets/reanalysis-datasets/era-interim>), ktorá je založená na štvodimenzionálnej variačnej analýze dát produkovaných modelom ECMWF. Stav atmosféry je v nej určený na 60 vertikálnych izobarických hladinách s hornou tlakovou hladinou 0,1 hPa na takmer rovnomerne rozloženej sieti s horizontálnym rozlíšením zhruba 79 × 79 km (Berrisford a kol., 2011).

[‡]NetCDF-4 (skratka z anglického termínu *Network Common Data Form version 4*) je súbor knižníc a dátový formát pre tvorbu, sprístupňovanie a zdieľanie maticovo orientovaných vedeckých dát. Ako dátový formát sa štandardne používa vo vedeckých oboroch. Podrobný popis je možné nájsť napr. na internetovej stránke: <https://www.unidata.ucar.edu/software/netcdf/>.



Obrázok 5.1: Oblasť realizácie simulácií modelom RegCM 4.6 s puferovou oblasťou (vľavo), resp. bez nej (vpravo). Na mapách sú vynesené nadmorské výšky v metroch nad morom (m n. m.), uvažované v modeli. Skreslenie mapy vzniká transformáciou Lambertovej projekčnej plochy na zemepisnú projekciu.

5.2 Validácia testovacích simulácií

Validáciou sa všeobecne označuje objektívne hodnotenie kvality modelových výstupov na základe ich porovnávania s ekvivalentmi z reálne nameraných dát. Aby zhodnotenie kvality bolo možné považovať za objektívne, je nutné modelové a reálne dáta porovnať pomocou rôznych štatistických ukazovateľov, pričom je vhodné vyhodnotiť viacero z nich, keďže každý z nich má rozdielnu výpovednú hodnotu o povahe a kvalite dát.

V rámci validácie sú porovnané polia:

- priemernej sezónnej teploty vzduchu vo výške 2 m nad zemským povrchom, \bar{T}_{2m} , v zimnej/letnej sezóne,
- priemerného denného maxima/minima teploty vzduchu vo výške 2 m nad zemským povrchom, $\bar{T}_{2m}^{max} / \bar{T}_{2m}^{min}$, v zimnej/letnej sezóne,
- priemerného denného zrážkového úhrnu v roku, \bar{P} , a v zimnej/letnej sezóne, $\bar{P}_{DJF} / \bar{P}_{JJA}$,

získané z výstupov jednotlivých testovacích simulácií s ich ekvivalentmi, ktoré boli určené z dát databázy E-OBS* (Cornes a kol., 2018). Následne sú popísané výsledky validácie priemernej dennej teploty vzduchu*, dennej maximálnej/minimálnej teploty vzduchu a denného úhrnu zrážok pomocou 3 štatistických

*E-OBS je označenie databázy vybraných meraných meteorologických prvkov, ktoré sú poskytované v pravidelnej sieti zemepisných šírok a dĺžok na pevninách. Databáza je vytváraná v rámci projektu *European Climate Assessment & Dataset* (ECA&D). Podrobnosti o nej je možné nájsť na internetovej stránke: <https://www.ecad.eu>. V práci boli k validácii použité polia priemerných denných teplôt vzduchu vo výške 2 m nad zemským povrchom, denných maxim/minim teploty vzduchu vo výške 2 m nad zemským povrchom a denných zrážkových úhrnov s priestorovým rozlíšením $0,25^\circ \times 0,25^\circ$ zemepisnej šírky, resp. dĺžky zo 17. verzie databázy.

*V rámci tejto podkapitoly je teplotou vzduchu vždy myslená teplota vzduchu v 2 m nad zemským povrchom.

charakteristík, konkrétne pomocou Pearsonovho korelačného koeficientu, strednej systematickej chyby a odmocniny strednej kvadratickej chyby, ktorých metodiky výpočtu sú popísané nižšie.

5.2.1 Metodika konštrukcie polí klimatických prvkov a výpočtu štatistických ukazovateľov

Pred samotnou validáciou testovacích simulácií je vhodné najskôr popísať, ako boli polia vyššie uvedených klimatických prvkov skonštruované, resp. uvedené štatistické ukazovatele vypočítané. Pretože databáza E-OBS obsahuje polia priemerných denných teplôt vzduchu, denných maxím/miním teploty vzduchu a denných zrážkových úhrnov, ako prvé boli polia týchto prvkov vypočítané z hodinových výstupov teploty vzduchu, resp. intenzity zrážok zo simulácií RegCM (PHA1) – RegCM (PHA4). Tie boli následne bilineárne interpolované do rovnomernej siete zemepisných šírok a dĺžok, ktorá je použitá v databáze E-OBS. Z takto pripravených polí príslušných meteorologických prvkov zo simulácií, ako aj z polí z databázy E-OBS boli zhotovené polia:

- priemernej sezónnej teploty vzduchu, \bar{T}_{2m} , a to ako aritmetické priemery polí dennej priemernej teploty vzduchu z dní príslušiacich do daných sezón;
- priemerného denného maxima, resp. minima teploty vzduchu, \bar{T}_{2m}^{max} , resp. \bar{T}_{2m}^{min} , a to ako aritmetické priemery polí dennej maximálnej, resp. minimálnej teploty vzduchu z dní príslušiacich do daných sezón;
- priemerného denného zrážkového úhrnu v roku, \bar{P} , a v zimnej, resp. v letnej sezóne, \bar{P}_{DJF} , resp. \bar{P}_{JJA} , a to ako aritmetické priemery polí denného zrážkového úhrnu zo všetkých dní roka, resp. z dní príslušiacich do daných sezón.

Výpočty boli pritom realizované pomocou skriptov vytvorených v príkazovom prostredí Bash[†], v ktorých boli použité funkcie zo softvéru CDO[‡] (ten umožňuje efektívne narábať s dátami vo formáte NetCDF-4 a bol vyvinutý pre štandardné spracovanie výstupov ako z modelov predpovedi počasia, tak z modelov klimatických).

Štatistické ukazovatele medzi interpolovanými poliami priemernej dennej teploty vzduchu, dennej maximálnej/minimálnej teploty vzduchu a denného úhrnu zrážok a ich ekvivalentmi z databázy E-OBS boli stanovené metodikou obdobnou tej, ktorú použili k hodnoteniu výsledkov simulácií z výstupov modelu RegCM Giorgi, Marinucci a Bates (1993). Najskôr bol pre každý deň, t , a každý meteorologický prvok, X , vypočítaný plošne vážený Pearsonov korelačný koeficient, $r_X(t)$, plošne vážená stredná systematická chyba, $b_X(t)$, a plošne vážená odmocnina strednej kvadratickej chyby, $RMSE_X(t)$, pomocou vzťahov:

[†]Bash je skratka z anglického názvu *Bourne again shell*. Podrobný popis tohto príkazového prostredia je možné nájsť napríklad na internetovej stránke: <https://devdocs.io/bash/>.

[‡]CDO je skratka z anglického názvu *Climate Data Operators*. Jedná sa o softvér, ktorý umožňuje vykonávať viac ako 700 rôznych operácií s dátami, a to nielen vo formáte NetCDF-4. Jeho podrobný popis je možné nájsť na internetovej stránke: <https://code.mpimet.mpg.de/projects/cdo/>, resp. v Schulzweidovom manuáli (Schulzweida, 2019).

$$r_X(t) = \sum_{i,j} \left(\alpha_{i,j} X_{i,j}^R X_{i,j}^E - \bar{X}^R \bar{X}^E \right) \sum_{i,j} \alpha_{i,j}$$

$$\left\{ \sqrt{\sum_{i,j} \left[\alpha_{i,j} \left(X_{i,j}^R \right)^2 - \left(\bar{X}^R \right)^2 \sum_{i,j} \alpha_{i,j} \right] \sum_{i,j} \left[\alpha_{i,j} \left(X_{i,j}^E \right)^2 - \left(\bar{X}^E \right)^2 \sum_{i,j} \alpha_{i,j} \right]} \right\}^{-1},$$

$$b_X(t) = \sum_{i,j} \alpha_{i,j} \left(X_{i,j}^R - X_{i,j}^E \right) \left(\sum_{i,j} \alpha_{i,j} \right)^{-1},$$

$$RMSE_X(t) = \sqrt{\sum_{i,j} \alpha_{i,j} \left(X_{i,j}^R - X_{i,j}^E \right)^2 \left(\sum_{i,j} \alpha_{i,j} \right)^{-1}},$$

kde: $X_{i,j}^R$, resp. $X_{i,j}^E$ reprezentuje plošný priemer X v sieťovej bunke so stredom na i -tej rovnobežke a j -tom poludníku v poli modelovom, resp. pozorovanom; \bar{X}^R , resp. \bar{X}^E je plošný priemer $X_{i,j}^R$, resp. $X_{i,j}^E$ cez celú geografickú oblasť a $\alpha_{i,j}$ sú váhy plôch sieťových buniek so stredom na i -tej rovnobežke a j -tom poludníku. Následne z nich boli vypočítané časové priemery pre rok, resp. danú ročnú sezónu, a to ako aritmetický priemer zo všetkých dní roka, resp. z dní príslušiacich do danej ročnej sezóny. Hodnoty všetkých vo validácii uvedených štatistických ukazovateľov tak reprezentujú časové aritmetické priemery plošne vážených štatistických ukazovateľov*. Tie boli pritom stanovené ako pre región Európy, tak aj pre región centrálnej Európy (uvedenými regiónmi sú v práci myslené geografické oblasti, vymedzené na študovanej oblasti modelu zemepisnými dĺžkami, resp. zemepisnými šírkami, ktoré sú uvedené v tab. 5.2).

K výpočtu štatistických ukazovateľov boli opäť vytvorené skripty v Bashi, v ktorých boli použité funkcie zo softvéru CDO. Ďalej boli pri spracovaní dát vytvorené programy v aplikácii RStudio[†], ktorá tiež umožňuje narábať s dátami vo formáte NetCDF-4. V týchto programoch boli použité mnohé z dostupných knižníc, vytvorených v prostredí R (napr. ncd4, hydroGOF, mapproj, ggplot2, tidyverse, akima či metR), ktoré umožňujú štatistické spracovanie dát, tak aj tvorbu grafických výstupov (všetky v práci prezentované grafické výstupy boli vytvorené práve v RStudiu).

Stručný popis štatistických ukazovateľov

Pearsonov korelačný koeficient, r , predstavuje jednu z možností číselného vyjadrenia miery korelácie medzi dvoma náhodnými premennými, pričom je definovaný ako podiel kovariancie dvoch veličín a súčinu ich štandardných odchýlok. Pre tento koeficient, ako uvádza Wilks (2006), platí napríklad, že:

*V rámci validácie sú časové aritmetické priemery plošne vážených štatistických ukazovateľov v texte označené len názvami samotných ukazovateľov (napríklad, strednou systematickou chybou sa myslí časový priemer plošne vážených stredných systematických chýb a obdobne pre zvyšné dva ukazovatele).

[†]RStudio je otvoreným vývojovým prostredím pre prácu v programovacom jazyku R. V práci boli použité rôzne verzie RStudia, až po verziu 3.6.1. Podrobný popis RStudia je možné nájsť na internetovej stránke: <https://rstudio.com/>.

Región	Rozsah zemepisných dĺžok [°]	Rozsah zemepisných šírok [°]
Európa	-10 – 32	36 – 62
Centrálna Európa	11 – 22	48 – 52
Západná Európa	-10 – 12	45 – 62
Východná Európa	12 – 62	45 – 62
Južná Európa	-10 – 32	36 – 45

Tabuľka 5.2: Geografické vymedzenie regiónov. Záporné/kladné hodnoty zemepisných dĺžok sú použité pre západné/východné zemepisné dĺžky (kladné hodnoty zemepisných šírok sú použité pre severné zemepisné šírky).

- môže nadobúdať hodnoty v uzatvorenom intervale od -1 po 1, pričom hodnota -1/1 znamená, že medzi študovanými náhodnými premennými existuje ideálna negatívna/pozitívna lineárna väzba (v rozptylovom diagrame ležia body na priamke s kladnou/zápornou smernicou), hodnota 0 znamená, že medzi náhodnými premennými neexistuje lineárna väzba (väzba medzi nimi pritom existovať môže, no nie je lineárna);
- nie je ani robustný (keďže nie je schopný poukázať na silnú, no nelineárnu väzbu medzi premennými), ani rezistantný (keďže je citlivý na prítomnosť odľahlých bodov od lineárnej závislosti).

Stredná systematická chyba, b , definovaná ako aritmetický priemer rozdielov medzi modelovými a pozorovanými hodnotami náhodnej premennej, poukazuje na priemerné odchyľovanie modelových a pozorovaných hodnôt náhodnej premennej. V ideálnom prípade ich zhody, b nadobúda hodnotu 0 (tú však nadobúda aj v prípade ekvivalentného nadhodnocovania a podhodnocovania hodnôt), v prípade jej kladnej/zápornej hodnoty, model systematicky v priemere nadhodnocuje/podhodnocuje hodnoty náhodnej premennej.

Odmocnina strednej kvadratickej chyby, $RMSE$, definovaná ako odmocnina z aritmetického priemeru kvadrátov rozdielu medzi modelovými a pozorovanými hodnotami náhodnej premennej, patrí medzi veľmi často používanú mieru pri validácii modelov. V prípade ideálnej zhody modelových a pozorovaných hodnôt náhodnej premennej, $RMSE$ nadobúda nulovú hodnotu, so zväčšovaním rozdielov medzi nimi, veľkosť $RMSE$ vzrastá (vhodné je upozorniť na to, že $RMSE$ je, použitím druhých mocnín v jej definícii, citlivá na prítomnosť odľahlých hodnôt rozdielov medzi modelovými a pozorovanými hodnotami náhodnej premennej). Ako uvádza Wilks (2006), $RMSE$ je možné považovať za typickú chybu medzi modelom a pozorovaním.

5.2.2 Výsledky validácie

Validácia teploty vzduchu v zimnej sezóne 2007

Polia rozdielu priemernej sezónnej teploty vzduchu a priemerného denného maxima/minima teploty vzduchu v zimnej sezóne 2007 určené medzi hodnotami zo simulácií RegCM (PHA1) – RegCM (PHA4) a z dát E-OBS databázy sú

zobrazené* na obr. 5.2, hodnoty štatistických ukazovateľov sú uvedené v tab. 6.8 – 6.10. Pretože v tejto stati sa všetky výsledky vzťahujú k zimnej sezóne 2007, v ďalšom texte nie je na túto skutočnosť explicitne poukazované.

Z porovnania polí priemernej sezónnej teploty vzduchu, viď obr. 5.2 (a), (d), (g), (i), je evidentné, že model ju má v regióne Európy tendenciu (v závislosti od použitého nastavenia parametrizácií) rôznym spôsobom nadhodnocovať, resp. podhodnocovať†, pričom je možné konštatovať, že k jej najväčšiemu nadhodnocovaniu, resp. podhodnocovaniu (a to ako v zmysle veľkosti geografickej oblasti, na ktorej k nemu dochádza, tak aj veľkosti rozdielu medzi \bar{T}_{2m}) dochádza v simulácii RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3). Rovnaké závery platia aj pre \bar{T}_{2m}^{max} , resp. \bar{T}_{2m}^{min} , čo je možné nahliadnúť z porovnania polí na obr. 5.2 (b), (e), (h), (j), resp. na obr. 5.2 (c), (f), (ch), (k). Tieto závery sú v súlade s hodnotami stredných systematických chýb (viď tab. 6.8), ktoré sú najvyššie, resp. najnižšie práve pre simuláciu RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3), a to konkrétne:

- 0,68 °C, resp. -0,41 °C pre priemernú dennú teplotu vzduchu, \bar{T}_{2m}^d ,
- -0,17 °C, resp. -1,37 °C pre denné maximum teploty vzduchu, $T_{2m}^{d,max}$,
- 1,62 °C, resp. 0,51 °C pre denné minimum teploty vzduchu, $T_{2m}^{d,min}$.

Rovnaké tvrdenia o najväčšom nadhodnocovaní, resp. podhodnocovaní \bar{T}_{2m} , \bar{T}_{2m}^{max} i \bar{T}_{2m}^{min} tým, ktoré boli uvedené pre región Európy, platia aj pre región centrálnej Európy, čo je opäť možné nahliadnúť z obr. 5.2. Sumárne ich možno zhrnúť tak, že všetky tri klimatické prvky sú najviac nadhodnotené, resp. podhodnotené v simulácii RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3). Tieto tvrdenia sú taktiež v súlade s hodnotami stredných systematických chýb v tomto regióne (viď tab. 6.9), ktoré sú najvyššie, resp. najnižšie práve pre simuláciu RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3), a to konkrétne:

- 0,56 °C, resp. -0,47 °C pre priemernú dennú teplotu vzduchu, \bar{T}_{2m}^d ,
- -0,36 °C, resp. -1,42 °C pre denné maximum teploty vzduchu, $T_{2m}^{d,max}$,
- 1,36 °C, resp. 0,24 °C pre denné minimum teploty vzduchu, $T_{2m}^{d,min}$.

Naopak, z porovnania hodnôt stredných systematických chýb je možné konštatovať, že k najmenšiemu priemernému systematickému odklonu modelových hodnôt od hodnôt pozorovaných dochádza v prípade:

- priemernej dennej teploty vzduchu v regióne Európy v simulácii RegCM (PHA4), resp. v regióne centrálnej Európy v simulácii RegCM (PHA1), pričom $b(\bar{T}_{2m}^d)$ je -0,05 °C, resp. 0,15 °C;
- denného maxima teploty vzduchu v oboch regiónoch v simulácii RegCM (PHA2), pričom $b(T_{2m}^{d,max})$ je -0,17 °C v regióne Európy, resp. -0,36 °C v regióne centrálnej Európy;

*Kvôli lepšej prehľadnosti textu sú v tejto a v nasledujúcej kapitole obrázky umiestnené vždy na konci príslušných podkapitol. Tabuľky sú uvedené v samostatnej tabuľkovej prílohe na konci práce.

†V rámci validácie ľubovoľného klimatického prvku je podhodnotením, resp. nadhodnotením mienené, že jeho hodnota určená z testovacej simulácie je nižšia, resp. vyššia ako tá, ktorá bola určená z dát E-OBS databázy.

- denného minima teploty vzduchu v oboch regiónoch v simulácii RegCM (PHA3), pričom $b(T_{2m}^{d,min})$ je $0,51\text{ °C}$ v regióne Európy, resp. $0,24\text{ °C}$ v regióne centrálnej Európy;

K zhodnoteniu chyby medzi modelovými a nameranými hodnotami všetkých 3 prvkov teploty vzduchu boli vypočítané odmocniny strednej kvadratickej chyby (viď. tab. 6.8 a 6.9). Na základe ich porovnania je vidieť, že model vystihuje:

- v regióne Európy:
 - priemernú dennú teplotu vzduchu:
 - * lepšie v simuláciách s Grellovou schémou, pričom $RMSE(\bar{T}_{2m}^d)$ je rovná $2,55\text{ °C}$ pre RegCM (PHA3), resp. $2,57\text{ °C}$ pre RegCM (PHA4);
 - * horšie v simuláciách s Tiedtkeho schémou, pričom $RMSE(\bar{T}_{2m}^d)$ nadobúda hodnotu $2,63\text{ °C}$ pre RegCM (PHA1), resp. $2,64\text{ °C}$ pre RegCM (PHA2);
 - denné minimum teploty vzduchu (rovnako ako v prípade \bar{T}_{2m}^d):
 - * lepšie v simuláciách s Grellovou schémou, pričom $RMSE(T_{2m}^{d,min})$ nadobúda hodnotu $3,22\text{ °C}$ pre RegCM (PHA3), resp. $3,33\text{ °C}$ pre RegCM (PHA4);
 - * horšie v simuláciách s Tiedtkeho schémou, pričom $RMSE(T_{2m}^{d,min})$ nadobúda hodnotu $3,45\text{ °C}$ pre RegCM (PHA1), resp. $3,49\text{ °C}$ pre RegCM (PHA2);
 - denné maximum teploty vzduchu:
 - * lepšie v simuláciách s Holtslagovou schémou, kde $RMSE(T_{2m}^{d,max})$ nadobúda hodnotu $2,85\text{ °C}$ pre RegCM (PHA2), resp. $2,96\text{ °C}$ pre RegCM (PHA4);
 - * horšie v simuláciách s UW schémou, pričom $RMSE(T_{2m}^{d,max})$ nadobúda hodnotu $3,00\text{ °C}$ pre RegCM (PHA1), resp. $3,07\text{ °C}$ pre RegCM (PHA3);
- v regióne centrálnej Európy najlepšie, resp. najhoršie:
 - priemernú dennú teplotu vzduchu v simulácii RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA1), pričom hodnota $RMSE(\bar{T}_{2m}^d)$ pre ňu je $2,40\text{ °C}$, resp. $2,59\text{ °C}$;
 - denné minimum teploty vzduchu v simulácii RegCM (PHA2) a RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA1), pričom hodnota $RMSE(T_{2m}^{d,min})$ pre ňu je $2,87\text{ °C}$, resp. $3,20\text{ °C}$;
 - denné maximum teploty vzduchu v simulácii RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA4), pričom hodnota $RMSE(T_{2m}^{d,max})$ pre ňu je $2,74\text{ °C}$, resp. $3,08\text{ °C}$.

V regióne Európy je možné hovoriť o pomerne vysokej miere kladnej korelácie medzi modelovými a pozorovanými \bar{T}_{2m}^d , $T_{2m}^{d,min}$, ako aj $T_{2m}^{d,max}$, keďže Pearsonove korelačné koeficienty pre ne dosahujú pomerne vysokých hodnôt, a to v intervale

0,83 – 0,90 (viď tab. 6.10). Najvyššie z nich sú pritom dosahované pre \overline{T}_{2m}^d , naopak najnižšie pre $T_{2m}^{d,min}$. V centrálnej Európe je miera korelácie menšia, Pearsonove korelačné koeficienty pre ne dosahujú hodnôt v intervale 0,59 – 0,71 (viď tab. 6.10), pričom aj v tomto regióne sú najvyššie z nich dosahované pre \overline{T}_{2m}^d a naopak najnižšie pre $T_{2m}^{d,min}$.

Validácia teploty vzduchu v letnej sezóne 2007

Polia rozdielu priemernej sezónnej teploty vzduchu a priemerného denného maxima/minima teploty vzduchu v letnej sezóne 2007 určené medzi hodnotami zo simulácií RegCM (PHA1) – RegCM (PHA4) a z dát E-OBS databázy sú zobrazené na obr. 5.3, hodnoty štatistických ukazovateľov sú uvedené v tab. 6.8 – 6.10. Pretože v tejto stati sa všetky výsledky vzťahujú k letnej sezóne 2007, v ďalšom texte nie je na túto skutočnosť explicitne poukazované.

Porovnanie polí modelových hodnôt \overline{T}_{2m} s pozorovaním, viď obr. 5.3 (a), (d), (g), (i), ukazuje, že tá je v regióne Európy plošne podhodnocovaná vo väčšej miere v simuláciách s UW schémou ako v simuláciách s Holtslagovou schémou. Rovnaký záver platí aj pre $T_{2m}^{d,max}$, resp. $T_{2m}^{d,min}$, čo je možné nahliadnúť z porovnania polí na obr. 5.3 (b), (e), (h), (j), resp. (c), (f), (ch), (k). Uvedené závery sú zároveň v súlade s hodnotami stredných systematických chýb (viď tab. 6.8), ktoré sú pre simulácie RegCM (PHA1) a RegCM (PHA3) menšie ako pre simulácie RegCM (PHA2) a RegCM (PHA4). Najvyššie, resp. najnižšie stredné systematické chyby sú dosahované pre simuláciu RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA3), a to konkrétne:

- -0,22 °C, resp. -1,59 °C pre priemernú dennú teplotu vzduchu, \overline{T}_{2m}^d ,
- -1,11 °C, resp. -3,22 °C pre denné maximum teploty vzduchu, $T_{2m}^{d,max}$,
- 0,63 °C, resp. -0,32 °C pre denné minimum teploty vzduchu, $T_{2m}^{d,min}$.

Rovnaké tvrdenia o výraznejšom podhodnocovaní \overline{T}_{2m} , resp. \overline{T}_{2m}^{max} v simuláciách s UW schémou ako v simuláciách s Holtslagovou schémou platia aj v regióne centrálnej Európy, čo je možné opäť nahliadnúť z obr. 5.2 (a), (d), (g), (i), resp. (b), (e), (h), (j). Tieto závery sú taktiež v súlade s hodnotami $b(\overline{T}_{2m}^d)$, resp. $b(T_{2m}^{d,max})$ (viď tab. 6.9), ktoré sú pre simulácie RegCM (PHA1) a RegCM (PHA3) nižšie ako pre simulácie RegCM (PHA2) a RegCM (PHA4), pričom najvyššiu, resp. najnižšiu hodnotu dosahujú pre simuláciu RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA3), a to konkrétne:

- -0,16 °C, resp. -1,80 °C pre priemernú dennú teplotu vzduchu, \overline{T}_{2m}^d ,
- -1,69 °C, resp. -3,89 °C pre denné maximum teploty vzduchu, $T_{2m}^{d,max}$.

Z obr. 5.3 (c), (f), (ch), (k) je zároveň možné konštatovať, že \overline{T}_{2m}^{min} je na väčšine tohto regiónu modelom nadhodnocovaná vo všetkých simuláciách s výnimkou RegCM (PHA3), v ktorej je naopak väčšinou podhodnotená. S týmto záverom opäť korešpondujú aj hodnoty $b(\overline{T}_{2m}^{d,min})$, ktoré sú kladné pre všetky simulácie s výnimkou RegCM (PHA3). Najvyššia, resp. najnižšia hodnota z nich je pritom dosahovaná pre simuláciu RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3), a to konkrétne

1,30 °C, resp. -0,16 °C. Z porovnania hodnôt stredných systematických chýb je súčasne možné uzavrieť, že k najmenšiemu priemernému systematickému odklonu modelových hodnôt od hodnôt pozorovaných dochádza v prípade:

- priemernej dennej teploty vzduchu ako v regióne Európy, tak aj v regióne centrálnej Európy v simulácii RegCM (PHA4), pričom $b(\overline{T}_{2m}^d)$ je -0,22 °C v regióne Európy, resp. -0,16 °C v regióne centrálnej Európy;
- denného maxima teploty vzduchu v oboch regiónoch v simulácii RegCM (PHA4), pričom $b(T_{2m}^{d,max})$ je -1,11 °C v regióne Európy, resp. -1,69 °C v regióne centrálnej Európy;
- denného minima teploty vzduchu v regióne Európy v simulácii RegCM (PHA1), resp. v regióne centrálnej Európy v simulácii RegCM (PHA3), pričom $b(\overline{T}_{2m}^d)$ je -0,04 °C, resp. -0,16 °C.

K zhodnoteniu typickej chyby medzi modelovými a nameranými hodnotami všetkých 3 prvkov teploty vzduchu boli vypočítané odmocniny strednej kvadratickej chyby, *RMSE*. Z porovnania ich hodnôt pre región Európy, resp. pre región centrálnej Európy, ktoré sú uvedené v tab. 6.8, resp. 6.9, je možné uzavrieť, že:

- pre priemernú dennú teplotu a pre denné maximum teploty vzduchu dosahujú v oboch regiónoch nižších hodnôt v simuláciách s Holtslagovou schémou ako v simuláciách so schémou UW, pričom najnižšiu, resp. najvyššiu hodnotu nadobúda v prípade:
 - priemernej dennej teploty vzduchu:
 - * v regióne Európy pre simuláciu RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA1), a to 1,97 °C, resp. 2,46 °C,
 - * v regióne centrálnej Európy pre simuláciu RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA3), a to 1,59 °C, resp. 2,30 °C,
 - denného maxima teploty vzduchu:
 - * v regióne Európy pre simuláciu RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA1), a to 3,14 °C, resp. 4,40 °C,
 - * v regióne centrálnej Európy pre simuláciu RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3), a to 3,30 °C, resp. 4,25 °C.
- pre denné minimum teploty vzduchu dosahujú v oboch regiónoch nižších hodnôt pre simulácie s UW schémou než pre simulácie s Holtslagovou schémou (t. j. opačne ako pre \overline{T}_{2m}^d a $T_{2m}^{d,max}$), pričom najnižšiu, resp. najvyššiu hodnotu nadobúda:
 - v regióne Európy pre simuláciu RegCM (PHA1), resp. RegCM (PHA2) a súčasne aj RegCM (PHA4), a to 2,20 °C, resp. 2,29 °C,
 - v regióne centrálnej Európy pre simuláciu RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA2), a to 1,86 °C, resp. 2,27 °C.

V sezóne letnej je tiež možné hovoriť o pomerne vysokej miere kladnej korelácie v regióne Európy medzi modelovými a pozorovanými \overline{T}_{2m}^d , $T_{2m}^{d,min}$ aj $T_{2m}^{d,max}$,

keďže Pearsonove korelačné koeficienty, uvedené v tab. 6.10, pre ne dosahujú relatívne vysokých hodnôt, a to v intervale 0,80 – 0,89. Najvyššie z nich sú pritom opäť dosahované pre \bar{T}_{2m}^d , nižšie pre $T_{2m}^{d,min}$, resp. pre $T_{2m}^{d,max}$. V regióne centrálnej Európy je miera kladnej korelácie menšia, Pearsonove korelačné koeficienty, uvedené v tab. 6.10, pre ne dosahujú hodnôt v intervale 0,51 – 0,74, pričom rovnako ako v regióne Európy, najvyššie z nich sú dosahované pre \bar{T}_{2m}^d , nižšie pre $T_{2m}^{d,min}$, resp. pre $T_{2m}^{d,max}$.

Validácia teploty vzduchu v roku 2007

V dvoch vyššie uvedených statiach boli podrobne popísané výsledky validácie 3 teplotných prvkov (priemernej dennej teploty vzduchu a denného minima/maxima teploty vzduchu) v regióne (centrálnej) Európy v zimnej/letnej sezóne, v tejto stati sú prehľadne zhrnuté výsledky ich validácie v rámci celého roka 2007.

Hodnoty sezónnych $b(\bar{T}_{2m}^d)$ v regióne (centrálnej) Európy, uvedené v tab. 6.8 a 6.9, poukazujú na tendenciu modelu rôznym spôsobom systematicky odchyľovať priemernú dennú teplotu vzduchu od pozorovaných hodnôt, pričom je z nich možné konštatovať, že:

- v regióne Európy dochádza pri všetkých v práci použitých nastaveniach modelu v priemere vždy k jej podhodnocovaniu v jarnej a v letnej sezóne, v sezóne zimnej a v jesennej je buď jej podhodnotenie menej výrazné ako na jar či v lete, alebo dochádza k jej nadhodnoteniu;
- v regióne centrálnej Európy dochádza:
 - pri všetkých použitých nastaveniach modelu v priemere k jej podhodnoteniu, resp. nadhodnoteniu v sezóne letnej, resp. v sezóne jesennej;
 - v sezóne zimnej k jej podhodnoteniu, resp. nadhodnoteniu v simuláciách s Grellovou, resp. s Tiedtkeho schémou;
 - v sezóne jarnej k jej podhodnoteniu s výnimkou simulácie RegCM (PHA2).

Ďalej sa ukazuje, viď tab. 6.8 a 6.9, že:

- absolútne hodnoty ročných $b(\bar{T}_{2m}^d)$ sú v regióne Európy menšie pre simulácie s Holtslagovou schémou ako pre simulácie s UW schémou; najmenšia, resp. najväčšia z nich je dosahovaná pre simuláciu RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3), pričom $b(\bar{T}_{2m}^d)$ je pre ňu rovná 0,02 °C, resp. -0,96 °C;
- hodnoty ročných $b(\bar{T}_{2m}^d)$ sú v regióne centrálnej Európy v priemere podhodnotené, resp. nadhodnotené v simuláciách s UW schémou, resp. s Holtslagovou schémou; najmenšia, resp. najväčšia absolútna hodnota ročnej $b(\bar{T}_{2m}^d)$ je dosahovaná pre simuláciu RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA3), pričom ročná $b(\bar{T}_{2m}^d)$ je pre ňu rovná 0,02 °C, resp. -0,73 °C;
- ročné hodnoty $RMSE(\bar{T}_{2m}^d)$ sú v oboch regiónoch menšie pre simulácie s Holtslagovou schémou než pre simulácie s UW schémou, pričom najmenšia,

resp. najväčšia z nich je dosahovaná v oboch regiónoch pre simuláciu RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA3), a to:

- 2,14 °C, resp. 2,42 °C v regióne Európy;
- 1,97 °C, resp. 2,22 °C. v regióne centrálnej Európy.

- všetky sezónne aj ročné hodnoty $RMSE(\bar{T}_{2m}^d)$ sú nižšie v regióne centrálnej Európy než v regióne Európy.

V rámci sezón i celého roka je dosahovaná vysoká miera kladnej korelácie \bar{T}_{2m}^d medzi modelovými a pozorovanými hodnotami v regióne Európy pri všetkých nastaveniach modelu, o čom svedčia pomere vysoké hodnoty Pearsonových korelačných koeficientov, uvedené aj s hodnotami pre centrálnu Európu v tab. 6.10, ktoré sú pre ne v intervale 0,86 – 0,90. Zároveň je možné konštatovať, že v regióne centrálnej Európy je miera kladnej korelácie v rámci sezón aj celého roka \bar{T}_{2m}^d nižšia, keďže hodnoty Pearsonových korelačných koeficientov sú v intervale 0,65 – 0,74.

Hodnoty sezónnych stredných systematických chýb denného maxima, resp. minima teploty vzduchu v regióne (centrálnej) Európy, uvedené v tab. 6.8 a 6.9, ukazujú, že model má tendenciu $T_{2m}^{d,max}$, resp. $T_{2m}^{d,min}$ väčšinou systematicky v priemere podhodnocovať, resp. nadhodnocovať. Ďalej, z ročných hodnôt $b(T_{2m}^{d,max})$, resp. $b(T_{2m}^{d,min})$, taktiež uvedených v tab. 6.8 a 6.9, je možné konštatovať, že model má pri všetkých v práci použitých nastaveniach tendenciu v rámci celoročného priemeru podhodnocovať $T_{2m}^{d,max}$, resp. nadhodnocovať $T_{2m}^{d,min}$ v oboch regiónoch, pričom k výraznejším:

- podhodnoteniam $T_{2m}^{d,max}$ dochádza v simuláciách s UW schémou; najmenšia, resp. najväčšia ročná $b(T_{2m}^{d,max})$ v zmysle absolútnej hodnoty je pritom dosahovaná v oboch regiónoch pre simuláciu RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3), pričom $b(T_{2m}^{d,max})$ je pre ňu rovná:
 - -0,98 °C, resp. -2,28 °C v regióne Európy;
 - -0,73 °C, resp. -2,19 °C v regióne centrálnej Európy;
- nadhodnoteniam $T_{2m}^{d,min}$ dochádza v simuláciách s Holtslagovou schémou; najmenšia, resp. najväčšia ročná $b(T_{2m}^{d,min})$ je pritom dosahovaná v oboch regiónoch pre simuláciu RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA2), pričom $b(T_{2m}^{d,min})$ je pre ňu rovná:
 - 0,16 °C, resp. 1,09 °C v regióne Európy;
 - 0,45 °C, resp. 1,55 °C v regióne centrálnej Európy.

Z porovnania ročných hodnôt odmocnín strednej kvadratickej chyby denného maxima, resp. minima teploty vzduchu v regióne (centrálnej) Európy, uvedených v tab. 6.8a 6.9, je vidieť, že:

- ročná $RMSE(T_{2m}^{d,max})$ nadobúda v oboch regiónoch nižších hodnôt pre simulácie s Holtslagovou schémou; najmenšiu, resp. najväčšiu hodnotu pritom dosahuje:

- v regióne Európy pre RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA3), a to 3,02 °C, resp. 3,66 °C;
- v centrálnej Európe pre RegCM (PHA2), resp. RegCM (PHA3), a to 2,81 °C, resp. 3,42 °C;
- ročná $RMSE(T_{2m}^{d,min})$ nadobúda v oboch regiónoch nižších hodnôt pre simulácie s UW schémou; najmenšiu, resp. najväčšiu hodnotu pritom v oboch regiónoch dosahuje pre simuláciu RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA2), a to:
 - 2,64 °C, resp. 2,74 °C v regióne Európy;
 - 2,39 °C, resp. 2,70 °C v regióne centrálnej Európy;
- sú pri všetkých použitých nastaveniach modelu nižšie v regióne centrálnej Európy než v regióne Európy.

V rámci sezón i celého roka je v regióne Európy dosahovaná pomerne vysoká miera kladnej korelácie medzi modelovými a pozorovanými hodnotami ako pre $T_{2m}^{d,max}$, tak aj pre $T_{2m}^{d,min}$ pri všetkých nastaveniach modelu (pričom pre $T_{2m}^{d,max}$ je väčšia ako pre $T_{2m}^{d,min}$), o čom svedčia pomere vysoké hodnoty Pearsonových korelačných koeficientov, uvedené v tab. 6.10, ktoré sú pre $T_{2m}^{d,max}$ v intervale 0,80 – 0,89 a pre $T_{2m}^{d,min}$ sú v intervale 0,79 – 0,84. V regióne centrálnej Európy nie sú dosahované tak vysoké kladné korelácie ani pre $T_{2m}^{d,max}$, ani pre $T_{2m}^{d,min}$, aké sú dosahované v regióne Európy, o čom svedčia nižšie hodnoty sezónnych i ročných Pearsonových korelačných koeficientov, uvedených taktiež v tab. 6.10, ktoré sú pre $T_{2m}^{d,max}$ v intervale 0,51–0,65 a pre $T_{2m}^{d,min}$ v intervale 0,50 – 0,65.

Validácia priemerných denných úhrnov zrážok v roku 2007 a v jeho zimnej/letnej sezóne

Polia rozdielu priemerného denného úhrnu zrážok v roku 2007, \bar{P} , a v jeho zimnej/letnej sezóne, $\bar{P}_{DJF}/\bar{P}_{JJA}$, určené medzi hodnotami zo simulácií RegCM (PHA1) – RegCM (PHA4) a z dát E-OBS databázy sú zobrazené na obr. 5.4, hodnoty štatistických ukazovateľov sú uvedené v tab. 6.11 a 6.12.

Z porovnania polí \bar{P} , \bar{P}_{DJF} i \bar{P}_{JJA} je evidentné, že model má tendenciu na väčšine oblastí v regióne (centrálnej) Európy v priemere nadhodnocovať priemerný denný zrážkový úhrn, a to bez ohľadu na použité nastavenie parametrizácií i na časové obdobie. Súčasne je vidieť, že:

- k najväčším nadhodnoteniam priemerného denného úhrnu zrážok dochádza v hornatých oblastiach a v ich blízkosti;
- k výraznejšiemu nadhodnocovaniu \bar{P} , ako aj \bar{P}_{DJF} a \bar{P}_{JJA} v oboch regiónoch dochádza v simuláciách s Tiedtkeho schémou konvekcie než v simuláciách so schémou Grellovou.

Druhý z týchto záverov je súčasne v súlade s hodnotami ročných, ako aj sezónnych stredných systematických chýb priemerného denného úhrnu zrážok, uvedených v tab. 6.11, ktoré sú v oboch regiónoch väčšie pre simulácie s Tiedtkeho schémou, t. j. v RegCM (PHA1) a v RegCM (PHA2), ako pre simulácie so schémou

Grellovou, t. j. v RegCM (PHA3) a v RegCM (PHA4). Najmenšia, resp. najväčšia hodnota strednej systematickej chyby priemerného denného úhrnu zrážok je pritom:

- v zimnej sezóne dosahovaná:
 - pre región Európy v simulácii RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA1), a to 1,31 mm, resp. 2,14 mm;
 - pre región centrálnej Európy v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA1), a to 0,87 mm, resp. 1,46 mm;
- v letnej sezóne dosahovaná:
 - pre región Európy v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA2), a to 1,37 mm, resp. 3,40 mm;
 - pre región centrálnej Európy v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA1), a to 1,64 mm, resp. 3,70 mm.

Zároveň, najmenšia, resp. najväčšia hodnota ročnej strednej systematickej chyby priemerného denného úhrnu zrážok je v oboch regiónoch dosahovaná v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA1), pričom jej hodnoty sú:

- pre región Európy 1,27 mm, resp. 2,57 mm;
- pre región centrálnej Európy 0,94 mm, resp. 1,88 mm.

Na základe porovnania ročných i sezónnych *RMSE* priemerného denného úhrnu zrážok, uvedených v tab. 6.11, je možné konštatovať, že pre ne (až na výnimku jesennej sezóny v regióne centrálnej Európy) platia rovnaké závery, ktoré boli uvedené pre stredné systematické chyby, a teda sú v oboch regiónoch väčšie pre simulácie s Tiedtkeho schémou ako pre simulácie so schémou Grellovou. Najmenšia, resp. najväčšia hodnota *RMSE* priemerného denného úhrnu zrážok je pritom:

- v zimnej sezóne dosahovaná:
 - pre región Európy v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA1), a to 4,81 mm, resp. 6,05 mm;
 - pre región centrálnej Európy v simulácii RegCM (PHA4), resp. RegCM (PHA1), a to 2,65 mm, resp. 3,32 mm;
- v letnej sezóne je pre oba regióny dosahovaná v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA2), pričom jej hodnoty sú:
 - pre región Európy 7,05 mm, resp. 10,05 mm;
 - pre región centrálnej Európy 5,62 mm, resp. 7,47 mm.

Zároveň, najmenšia, resp. najväčšia hodnota ročnej *RMSE* priemerného denného úhrnu zrážok je dosahovaná:

- pre región Európy v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA1) a RegCM (PHA2), a to 5,65 mm, resp. 7,85 mm;

- pre región centrálnej Európy v simulácii RegCM (PHA3), resp. RegCM (PHA1), a to 3,76 mm, resp. 4,51 mm;

Hodnoty ročných i sezónnych Pearsonových korelačných koeficientov medzi modelovými a pozorovanými hodnotami priemerného denného úhrnu zrážok, uvedené v tab. 6.12, poukazujú na malú mieru kladnej korelácie, ktorá je pritom všeobecne vyššia v regióne Európy ako v regióne centrálnej Európy. V rámci sezón je najväčšia v zimnej sezóne (v intervale 0,45 – 0,49, resp. 0,28 – 0,31 pre región Európy, resp. centrálnej Európy), naopak najnižšia je v sezóne letnej (v intervale 0,25 – 0,31, resp. 0,10 – 0,17 pre región Európy, resp. centrálnej Európy), ročné hodnoty sa pohybujú v intervale 0,34 – 0,41, resp. 0,20 – 0,23 pre región Európy, resp. centrálnej Európy.

Stručné zhrnutie výsledkov validácie

Výsledky validácie jednoznačne odzrkadľujú vplyv zvolených parametrizácií MVA a konvekcie na polia porovnávaných prvkov teploty vzduchu a zrážok, ktorý je závislý ako od geografickej polohy, tak aj od nadmorskej výšky a od času. Pretože k hodnoteniu typickej chyby medzi modelovými výstupmi a ich ekvivaletmi z pozorovaní bola vybraná odmocnina strednej kvadratickej chyby, *RMSE*, závery budú zhrnuté práve pre ňu, presnejšie teda pre jej ročné hodnoty, a to s cieľom poukázať na zhodnotenie celoročnej kvality študovaných simulácií.

Výsledky validácie ročnej *RMSE* priemernej dennej teploty vzduchu ukázali, že nižších hodnôt dosahuje v simuláciách s Holtslagovou schémou MVA, pričom najnižšiu z nich dosiahla v oboch študovaných regiónoch pre simuláciu RegCM(PHA4). Obdobne, výsledky validácie ročnej *RMSE* denného maxima teploty vzduchu ukázali, že nižších hodnôt dosahuje v simuláciách s Holtslagovou schémou, pričom najnižšiu z nich dosiahla pre simuláciu RegCM(PHA4) v regióne Európy, resp. pre RegCM(PHA2) v regióne centrálnej Európy. Z výsledkov validácie ročnej *RMSE* denného minima teploty vzduchu naopak vyplýva, že nižších hodnôt dosahuje v simuláciách s UW schémou MVA, pričom najnižšiu z nich dosiahla v oboch regiónoch pre simuláciu RegCM(PHA3). Výsledky validácie ročnej *RMSE* priemerného denného úhrnu zrážok ukázali, že nižších hodnôt dosahuje v simuláciách s Grellovou schémou konvekcie, pričom najnižšiu z nich dosiahla v oboch regiónoch pre simuláciu RegCM(PHA3). Súčasne pre všetky štyri študované prvky platí, že nižšie ročné *RMSE* dosahujú v regióne centrálnej Európy ako v regióne Európy.

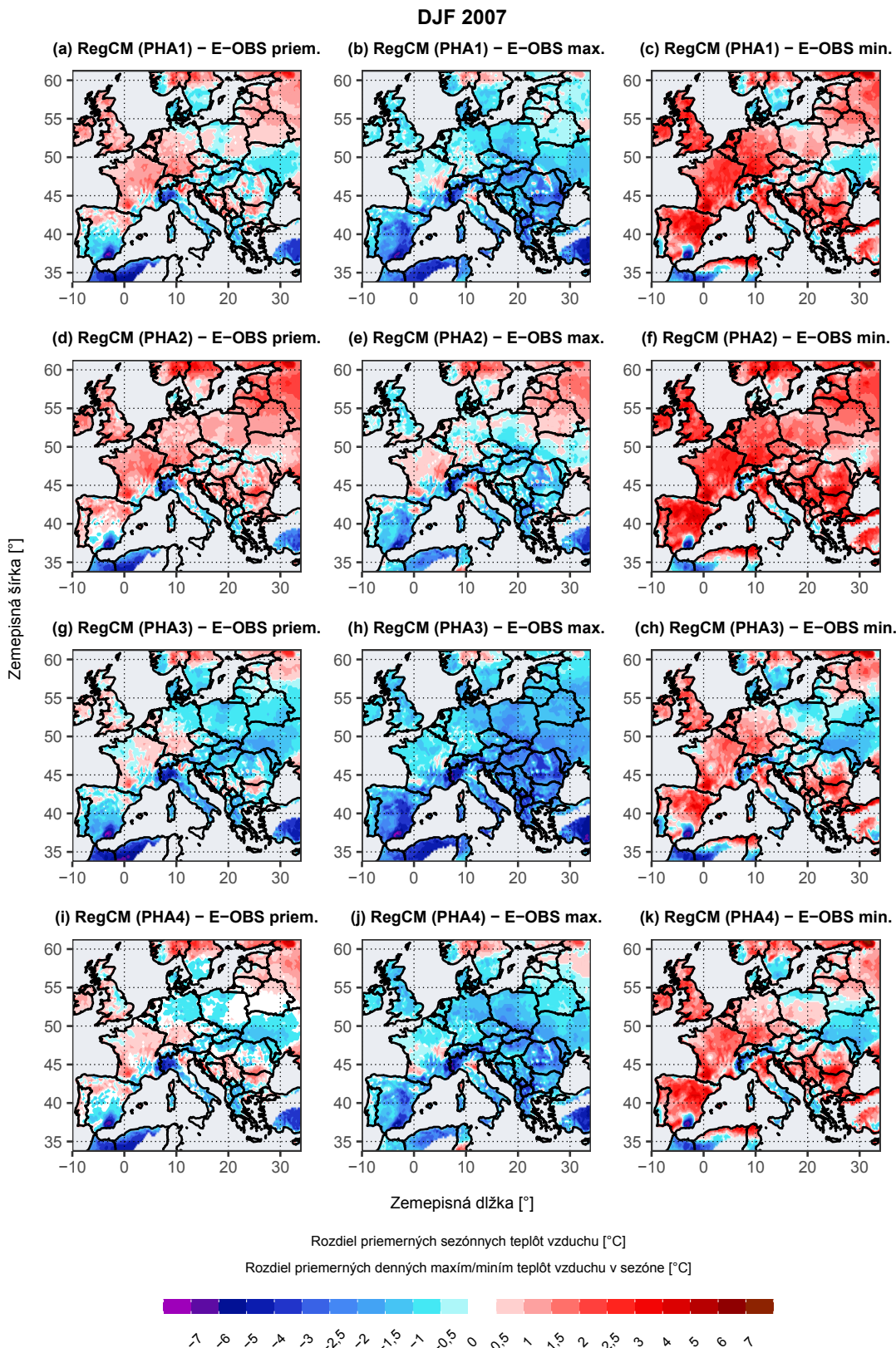
Zároveň je dôležité upozorniť a brať do úvahy, že uvedené výsledky validácie nie je možné považovať za univerzálne závery o povahe dopadov študovaných parametrizácií na zmeny polí klimatických prvkov, keďže dĺžka simulácií bola len jeden rok, čo je z klimatologického pohľadu veľmi krátka doba. Uvedené výsledky totiž:

- sú ovplyvnené počiatočným stavom parametrov modelu, z ktorého boli simulácie spúšťané, ako napríklad pôdnou vlhkosťou, ktorá významne ovplyvňuje toky tepla (či už cíteného, ako aj latentného) a vlhkosti na zemskom povrchu, a teda aj celkovú tepelnú bilanciu zemského povrchu, čo sa nevyhnutne prejaví i na stave atmosféry. Práve z dôvodu relaxácie parametrov zemského povrchu k hodnotám, ktoré je možné považovať za nezávislé

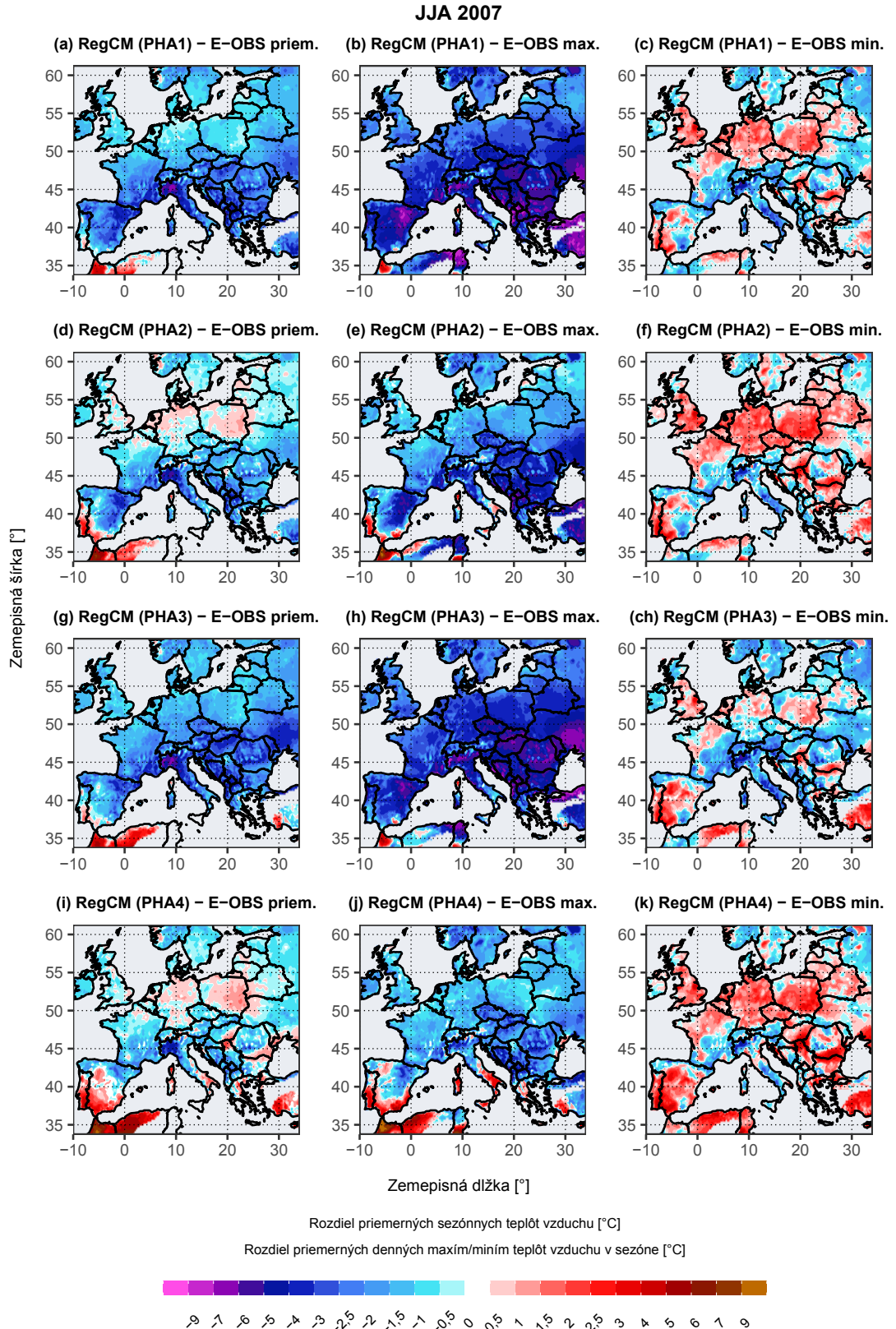
od počiatočného stavu spustenia simulácie (t. j. k hodnotám určeným dynamickou rovnováhou klimatického systému, ktorá sa v modeli postupne ustanoví), je nutné model po určitú dobu „nechať rozbehnúť*“. Na druhú stranu, tento čas pri použití modelu zemského povrchu CLM 4.5 by mal byť redukovaný, keďže ako vstupné hodnoty pôdných vlhkostí sú použité jej klimatologické priemery (Elguindi a kol., 2014).

- reflektujú dopady parametrizácií len pre vybranú skupinu po sebe nasledujúcich synoptických situácií, ktoré v priebehu roka 2007, resp. jeho sezón nastali nad a v okolí Európy, čo je malý počet z celkového spektra možností, ku ktorým dochádza napríklad na časovej škále 30 rokov, ktorá je používaná pre stanovovanie klimatických normálov.

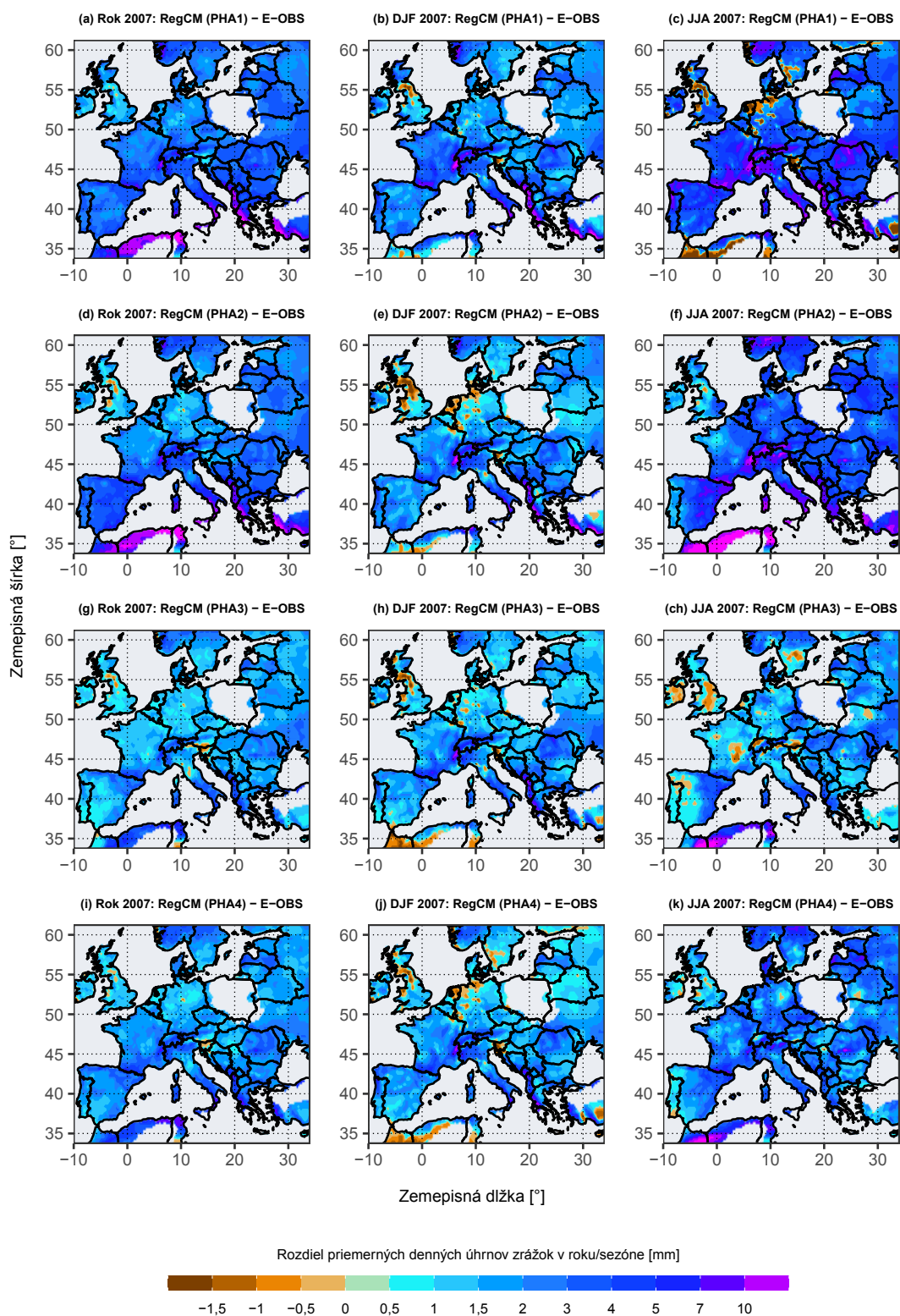
*V anglicky písanej literatúre sa tento rozbehový čas modelu označuje termínom *spin-up time (period)*.



Obrázok 5.2: Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vzduchu (obr. v ľavom stĺpci), resp. rozdielov priemerných denných maxím/miním teploty vzduchu v °C (obr. v prostrednom/pravom stĺpci) v zimnej sezóne 2007 určené zo simulácií: RegCM (PHA1), RegCM (PHA2), RegCM (PHA3), RegCM (PHA4) a z dát z E-OBS databázy (zorané v riadkoch v uvedenom poradí).



Obrázok 5.3: Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vzduchu (obr. v ľavom stĺpci), resp. rozdielov priemerných denných maxím/miním teploty vzduchu v °C (obr. v prostrednom/pravom stĺpci) v letnej sezóne 2007 určené zo simulácií: RegCM (PHA1), RegCM (PHA2), RegCM (PHA3), RegCM (PHA4) a z dát z E-OBS databázy (zorané v riadkoch v uvedenom poradí).



Obrázok 5.4: Polia rozdielu priemerných denných úhrnov zrážok v roku 2007 (obr. v ľavom stĺpci), resp. v jeho zimnej/letnej sezóne (obr. v prostrednom/pravom stĺpci) v mm určené zo simulácií: RegCM (PHA1), RegCM (PHA2), RegCM (PHA3), RegCM (PHA4) a z dát z E-OBS databázy (zorané v riadkoch v uvedenom poradí).

5.3 Analýza testovacích simulácií

Dopady zmien parametrizácií MVA a konvekcie v testovacích simuláciách sú v nasledujúcej analýze prezentované pre:

- priemernú sezónnu výšku MVA, priemerné denné maximum, resp. minimum výšky MVA v sezóne, priemernú sezónnu teplotu vzduchu vo výške 2 m nad zemským povrchom, priemerný denný úhrn zrážok v sezóne, priemerný sezónny horizontálny vietor na najnižšej modelovej medzihladine ($\sigma = 0,995$), a to pomocou polí ich rozdielu medzi simuláciami,
- plošné sezónne priemery teploty vzduchu, mernej vlhkosti vzduchu a veľkosti horizontálnej rýchlosti vetra, a to pomocou vertikálnych profilov ich rozdielu medzi simuláciami,

pričom sú medzi sebou porovnávané simulácie:

- s rovnakou parametrizáciou konvekcie – tieto výsledky poukazujú na dopady zmien parametrizácií MVA pri zachovaní parametrizácie konvekcie, pričom je vždy študovaný rozdiel medzi simuláciou s Holtslagovou schémou a simuláciou s UW schémou, teda rozdiel medzi RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), resp. medzi RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3);
- s rovnakou parametrizáciou MVA – tieto výsledky poukazujú na dopady zmien parametrizácií konvekcie pri zachovaní parametrizácie MVA, pričom je vždy študovaný rozdiel medzi simuláciou s Grellovou schémou a simuláciou s Tiedtkeho schémou, t. j. rozdiel medzi RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), resp. medzi RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2).

Pretože najvýraznejšie dopady počasia na zmeny koncentrácií polutantov v troposfére je možné očakávať v zimnej a v letnej sezóne roka (o čom bolo pojednané v kapitole 2), analýza je zameraná práve na ne. Primárnym cieľom analýzy je, prirodzene, preštudovať vplyv zmien parametrizácií na zmeny modelovanej troposféry, zároveň však výsledky z nej plynúce poslúžia k možnému objasneniu dopadov zmien parametrizácií aj na zmeny koncentrácií polutantov v nasledujúcej kapitole.

5.3.1 Metodika konštrukcie polí a vertikálnych profilov rozdielu klimatických prvkov

Pred samotnou analýzou je vhodné popísať, ako boli polia a vertikálne profily rozdielu vyššie uvedených klimatických prvkov vytvorené. Všetky nižšie popísané výpočtové úkony s modelovými dátami boli pritom opäť zrealizované pomocou skriptov vytvorených v Bashi, v ktorých boli použité funkcie zo softvéru CDO.

Polia rozdielov všetkých klimatických prvkov boli vypočítané ako rozdiely polí týchto prvkov. K analýze výšky MVA boli skonštruované polia rozdielov priemerných sezónnych výšok MVA, ako aj polia rozdielov priemerných denných maxim/minim výšky MVA v zimnej/letnej sezóne. Polia priemernej sezónnej výšky MVA, resp. priemerného denného maxima/minima výšky MVA v sezóne boli zhotovené tak, že predstavujú aritmetický priemer polí priemernej dennej výšky MVA, resp. polí denného maxima/minima výšky MVA z dní, ktoré spadajú do

príslušnej sezóny. Polia priemernej dennej výšky MVA boli pritom vypočítané ako aritmetické priemery z hodinových polí výšky MVA pre jednotlivé dni, polia denného maxima/minima výšky MVA boli vypočítané tak, že z hodinových polí výšky MVA bola vybraná najvyššia/najnižšia dosiahnutá hodnota pre každý deň. K analýze rozdielov priemerných sezónnych teplôt vzduchu vo výške 2 m nad zemským povrchom a priemerných denných úhrnov zrážok v sezóne boli použité polia týchto klimatických prvkov, ktoré boli vytvorené v rámci prípravy polí k validácii a boli popísané v predchádzajúcej podkapitole. K analýze horizontálneho vetra na najnižšej modelovej medzihladine ($\sigma = 0,995$) boli zhotovené polia vektorových rozdielov priemerných sezónnych horizontálnych vetrov v zimnej/letnej sezóne. Polia priemernej sezónnej veľkosti a smeru horizontálneho vetra boli pritom vypočítané z hodinových polí meridionálnej a zonálnej zložky vetra, a to tak, že najskôr boli vypočítané polia priemernej sezónnej veľkosti oboch týchto zložiek zvlášť a následne z nich bola vypočítaná veľkosť i smer horizontálneho vetra.

Vertikálne profily rozdielov všetkých klimatických prvkov boli vypočítané ako rozdiely vertikálnych profilov týchto prvkov. K analýze dopadov zmien parametrizácií na trojrozmerné polia teploty vzduchu, mernej vlhkosti vzduchu a veľkosti horizontálnej rýchlosti vetra boli skonštruované vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych teplôt vzduchu, priemerných sezónnych merných vlhkostí vzduchu a priemerných sezónnych veľkostí horizontálnej rýchlosti vetra nad oblasťami západnej, východnej a južnej Európy. Uvedenými regiónmi sú pritom v práci myslené geografické oblasti, ktoré sú na študovanej oblasti vymedzené zemepisnými dĺžkami, resp. zemepisnými šírkami uvedenými v tab. 5.2. Vertikálne profily priemernej sezónnej teploty vzduchu (obdobne aj priemernej sezónnej mernej vlhkosti vzduchu a priemernej sezónnej veľkosti horizontálnej rýchlosti vetra) boli skonštruované tak, že na každej modelovej hladine bol určený plošný aritmetický priemer priemernej sezónnej teploty vzduchu* (obdobne aj priemernej sezónnej mernej vlhkosti vzduchu a priemernej sezónnej veľkosti horizontálnej rýchlosti vetra) zo všetkých bodov siete, ktorých súradnice spadajú do jednotlivých regiónov.

5.3.2 Výsledky analýzy klimatických prvkov

Výsledky pre klimatické prvky späté s výškou medznej vrstvy atmosféry

Polia rozdielov priemerných sezónnych výšok MVA, ako aj polia rozdielov priemerných denných maxim/minim výšky MVA v zimnej, resp. v letnej sezóne sú zobrazené na obr. 5.5, resp. 5.6.

Z polí zobrazených na obr. 5.5 (a) – (f), resp. 5.6 (a) – (f) je možné konštatovať, že v nezávislosti od použitej schémy konvekcie sú priemerná sezónna výška MVA, \bar{h} , i priemerné denné maximum (minimum) výšky MVA v sezóne, \bar{h}_{max} (\bar{h}_{min}), takmer na celej oblasti nadhodnotené[†], a to ako v zimnej, tak aj v letnej sezóne,

*V rámci analýzy testovacích simulácií sú plošné aritmetické priemery priemernej sezónnej teploty vzduchu nad daným regiónom označované len ako priemerné sezónne teploty vzduchu nad daným regiónom (rovnaký spôsob označenia je použitý aj pre plošné aritmetické priemery priemerných sezónnych merných vlhkostí vzduchu a priemerných sezónnych veľkostí horizontálnej rýchlosti vetra).

[†]Pri porovnávaní polí, resp. vertikálnych profilov zo simulácií s rovnakou schémou konvek-

príčom toto nadhodnotenie je najčastejšie:

- v zimnej sezóne do 400 – 750 m pre \bar{h} , do 500 – 750 m pre \bar{h}_{max} a do 200 – 750 m pre \bar{h}_{min} (vyššie hodnoty z intervalov sú pritom dosahované najmä nad vodnými plochami);
- v letnej sezóne do 200 – 1000 m pre \bar{h} , do 200 – 1250 m pre \bar{h}_{max} a do 100 – 500 m pre \bar{h}_{min} (vyššie hodnoty z intervalov sú pritom pre \bar{h} a \bar{h}_{max} dosahované najmä nad pevninami, t. j. opačne ako v sezóne zimnej);

Súčasne, v oboch sezónach je na väčšine pevniny amplitúda výšky medzi rozdielom \bar{h}_{min} a \bar{h}_{max} väčšia v simuláciách s Grellovou schémou ako v simuláciách s Tiedtkeho schémou.

Modulácie \bar{h} , \bar{h}_{max} i \bar{h}_{min} spôsobené zmenou parametrizácie konvekcie pri zachovaní schémy MVA v zimnej, resp. v letnej sezóne sú zobrazené na obr. 5.5 (g) – (k), resp. 5.6 (g) – (k). Na základe ich porovnania je možné konštatovať, že k výraznejším zmenám zmiených klimatických prvkov dochádza v oboch sezónach v simuláciách s Holtslagovou schémou. Obzvlášť za zmienku stoja výrazné rozdiely \bar{h}_{max} v letnej sezóne práve pri použití Holtslagovej schémy, kde \bar{h}_{max} je pomerne výrazne podhodnotenú nad centrálnou oblasťou Stredozemného mora (viac než o 200 m), no zároveň výrazne nadhodnotenú napríklad nad Balkánskym polostrovom či nad Tureckom (presahujúc rozdiel 1000 m).

Výsledky pre priemernú sezónnu teplotu vzduchu

Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych teplôt vzduchu v zimnej i v letnej sezóne nad regiónmi Európy sú zobrazené na obr. 5.7, polia rozdielov priemerných sezónnych teplôt vzduchu vo výške 2 m nad zemským povrchom v zime, resp. v lete sú zobrazené na obr. 5.8 (a) – (d), resp. 5.9 (a) – (d).

Na základe vertikálnych profilov zobrazených na obr. 5.8 (a), (b), (e) a (f) je možné konštatovať, že bez ohľadu na použitú schému konvekcie je priemerná sezónna teplota vzduchu, \bar{T} , na nižších modelových hladinách nad všetkými 3 regiónmi Európy v oboch sezónach nadhodnotená. Ako je vidieť na obr. 5.8 (a) a (b), resp. 5.9 (a) a (b), vo výške 2 m nad zemským povrchom je pritom:

- nadhodnotenie \bar{T} v zime najčastejšie do 1 – 1,5 °C (súčasne je vidieť, že napríklad v oblastiach Nemecka, Beneluxu, Álp, južného Francúzska, na východnom pobreží Veľkej Británie a ďalších je \bar{T} naopak podhodnotená, a to najčastejšie do 0,5 °C);
- nadhodnotenie \bar{T} v lete najčastejšie do 1 – 1,5 °C pri použití Tiedtkeho schémy, resp. do 1 – 2,5 °C pri použití Grellovej schémy (no napríklad v oblastiach Maďarska, severného pobrežia Čierneho mora, či v južnom Španielsku presahuje 3 °C*).

cie je nadhodnotením/podhodnotením klimatického prvku mienené, že jeho hodnota je vyššia/nížšia v simulácii s Holtslagovou schémou ako v simulácii s UW schémou. Obdobne, pri porovnávaní polí, resp. vertikálnych profilov zo simulácií s rovnakou schémou MVA je nadhodnotením/podhodnotením klimatického prvku mienené, že jeho hodnota je vyššia/nížšia v simulácii s Grellovou schémou ako v simulácii s Tiedtkeho schémou.

*Na tomto mieste je vhodné podotknúť, že v okrajových častiach študovanej oblasti môžu byť diferencie medzi poľami klimatických prvkov výrazne väčšie ako na jej zvyšku, čo je pravde-

Z vyššie zmienených vertikálnych profilov je ďalej vidieť, že s rastúcou výškou buď priamo od zemského povrchu, alebo od istej výšky nad ním nadhodnotenie \bar{T} klesá, pričom v zimnej sezóne nad všetkými 3 regiónmi a v letnej sezóne nad regiónom južnej Európy dochádza dokonca ku vzniku vrstvy, kde je \bar{T} naopak podhodnotená. Nad ňou vykazujú rozdiely \bar{T} medzi simuláciami najskôr takmer izotermiu (poprípade dochádza len k ich miernym zmenám) v oboch sezónach, no vo vysokých hladinách dochádza opäť k podhodnoteniu \bar{T} , ktoré je výraznejšie v letnej sezóne. Evidentná je taktiež ako geografická závislosť modulácií \bar{T} (pričom najmenšia je nad západnou Európou), tak aj časová závislosť, pri ktorej je možné konštatovať, že nadhodnotenú oblasť \bar{T} v nižších vrstvách troposféry sú vertikálne mohutnejšie v letnej sezóne ako v sezóne zimnej: v lete presahujú hladiny $\sigma = 0,8$ (priemerné výšky σ -hladín sú uvedené v obrázkoch), v zime presahujú hladiny $\sigma = 0,9$. Zároveň je vidieť, že pri zmene schém MVA sú modulácie \bar{T} v letnej sezóne markantnejšie pri použití Grellovej schémy konvekcie.

Vertikálne profily zmien \bar{T} vyvolaných výmenou schémy konvekcie pri zachovaní schémy MVA v zimnej, resp. v letnej sezóne sú zobrazené na obr. 5.7 (c), (d) resp. (g), (h). Z nich je vidieť, že bez ohľadu na použitú schému MVA je \bar{T} v zime podhodnotená nad všetkými 3 regiónmi Európy, a to od zemského povrchu až po hladinu σ okolo 0,25, pričom maximum podhodnotenia \bar{T} je v závislosti od regiónu dosahované na hladinách σ v intervale približne 0,85 – 0,75. Vo výške 2 m nad zemským povrchom je pritom toto podhodnotenie:

- nad väčšinou pevniny najčastejšie do 0,5 – 1 °C pri použití UW schémy, pri použití Holtslagovej schémy sú oblasti s podhodnotením väčším než 1 °C plošne rozsiahlejšie ako pri použití schémy UW;
- nad morami a oceánom najčastejšie do 0,5 °C pri použití oboch schém MVA;

čo je možné nahliadnúť z obr. 5.8 (c) a (d). Z vyššie zmienených vertikálnych profilov je ďalej vidieť, že medzi hladinami σ v intervale asi 0,7 – 0,4 vykazujú profily rozdielu \bar{T} takmer izotermiu s výnimkou západnej Európy, nad ktorou dochádza s rastúcou výškou k zmenšovaniu podhodnotenia \bar{T} . Nad hladinou σ okolo 0,25 je \bar{T} naopak nadhodnotená, a to bez ohľadu na použitú schému MVA nad všetkými 3 regiónmi Európy.

V lete sú \bar{T} pri použití UW schémy na nižších vrstvách podhodnotené nad západnou a východnou Európou, nad južnou Európou sú naopak nadhodnotené; pri použití Holtslagovej schémy sú \bar{T} nadhodnotené nad všetkými 3 regiónmi. Vo výške 2 m nad zemským povrchom je \bar{T} :

- väčšinou podhodnotená v severnejších oblastiach študovanej oblasti, a to:
 - pri UW schéme najčastejšie do 0,5 – 1 °C v oblastiach vyšších ako zhruba 45° severnej z. š.;
 - pri Holtslagovej schéme najčastejšie do 0,5 °C v oblastiach vyšších ako zhruba 50° – 55° severnej z. š.;
- väčšinou nadhodnotená v južnejších oblastiach študovanej oblasti, a to:

podobne spôsobené vplyvom napojenia okrajových podmienok v ich blízkosti, ako aj vplyvom tvaru terénu (hornatých oblastí na častiach okraja študovanej oblasti). V rámci analýzy preto na tieto oblasti nie je väčšinou v texte braný ohľad, i keď sú vo výsledných poliach prezentované.

- pri UW schéme najčastejšie do 1 – 1,5 °C v oblastiach nižších ako zhruba 45° severnej z. š. (na juhu Španielska a Turecka je nadhodnotenie ešte výraznejšie);
- pri Hotlsagovej schéme najčastejšie do 1 – 2 °C v oblastiach nižších ako zhruba 50° – 55° severnej z. š. (na juhu Španielska a Turecka je nadhodnotenie ešte výraznejšie než pri použití UW schémy);

čo je možné nahliadnúť z obr. 5.9 (c) a (d). Z vyššie zmienených vertikálnych profilov je ďalej vidieť, že bez ohľadu na použitú schému MVA vykazuje rozdiel \bar{T} s rastúcou výškou od zemského porchu po hladinu zhruba $\sigma = 0,9$ najskôr izotermiu nad západnou a východnou Európou, resp. nárast nadhodnotenia \bar{T} nad južnou Európou. Nad ňou dochádza s rastúcou výškou k zmešovaniu nadhodnotenia \bar{T} , resp. k zväčšovaniu podhodnotenia \bar{T} , a to až po hladinu zhruba $\sigma = 0,25$ (s výnimkou hladín σ zhruba v intervale: 0,8 – 0,7 nad západnou a východnou Európou pri použití UW schémy; 0,8 – 0,6 nad západnou Európou, 0,7 – 0,6 nad východnou Európou a 0,6 – 0,5 nad južnou Európou pri použití Holtslagovej schémy, kde dochádza naopak k zmešovaniu podhodnotenia \bar{T}). Nad hladinou $\sigma = 0,25$ dochádza k zmešovaniu podhodnotenia \bar{T} a nad hladinou $\sigma = 0,15$ je bez ohľadu na použitú schému MVA \bar{T} nadhodnotená nad všetkými 3 regiónmi.

Výsledky pre priemerné denné úhrny zrážok v sezóne

Z polí rozdielov priemerných denných úhrnov zrážok v sezóne, ktoré sú zobrazené na obr. 5.8 (e) a (f), resp. 5.9 (e) a (f), je bez ohľadu na použitú schému konvekcie možné konštatovať, že priemerný denný úhrn zrážok v zime, resp. v lete je na študovanej oblasti pomerne nehomogénne nadhodnocovaný, resp. podhodnocovaný, pričom:

- v zimnej sezóne:
 - je nadhodnotenie pri použití oboch schém konvekcie najčastejšie do 1 – 2 mm, resp. podhodnotenie je pri použití Tiedtkeho schémy najčastejšie do 2 mm a pri použití Grellovej schémy najčastejšie do 1 mm;
 - sú plochy s nadhodnotením rozsiahlejšie pri použití Grellovej schémy;
- v letnej sezóne:
 - je nadhodnotenie pri použití Tiedtkeho schémy najčastejšie do 1 – 5 mm a pri použití Grellovej schémy najčastejšie do 1 – 3 mm, resp. podhodnotenie je pri použití oboch schém konvekcie najčastejšie do 1 – 2 mm;
 - nadhodnotené plochy dominujú pri použití Tiedtkeho schémy najmä v oblastiach Stredomoria, Álp a južnej Škandinávie, pri použití Grellovej schémy dominujú najmä nad pevninou.

Z polí zobrazených na obr. 5.8 (g) a (h), resp. 5.9 (g) a (h) je bez ohľadu na použitú schému MVA možné uzavrieť, že priemerný denný úhrn zrážok v zime, resp. v lete je na väčšine študovanej oblasti podhodnocovaný, pričom:

- v zimnej sezóne:

- je podhodnotenie pri použití oboch schém MVA najčastejšie do 1 – 3 mm (v centrálnej a vo východnej oblasti Stredozemného mora, ako aj v oblasti severozápadne od Škótska sú podhodnotenia ešte výraznejšie);
 - sú plochy s nadhodnotením, ktoré je pri použití oboch schém MVA najčastejšie do 1 – 2 mm, rozsiahlejšie pri použití Holtslagovej schémy;
- v letnej sezóne:
 - je podhodnotenie výraznejšie pri použití Tiedtkeho schémy (najčastejšie do 1 – 5 mm) s výnimkou centrálnej oblasti Stredozemného mora a oblasti severnej Afriky, kde je výraznejšie pri použití Holtslagovej schémy;
 - sú plochy s nadhodnotením, ktoré je pri použití oboch schém MVA najčastejšie do 1 – 2 mm, rozsiahlejšie pri použití Holtslagovej schémy.

Výsledky pre priemernú sezónnu mernú vlhkosť vzduchu

Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych merných vlhkostí vzduchu v zimnej i v letnej sezóne nad regiónmi Európy sú zobrazené na obr. 5.10.

Z profilov zobrazených na obr. 5.10 (a) a (b) je možné konštatovať, že bez ohľadu na použitú schému konvekcie je priemerná sezónna merná vlhkosť vzduchu, \bar{s} , pri zemskom povrchu v zime nadhodnotená v západnej a vo východnej Európe, resp. podhodnotená v južnej Európe. Následne, s rastúcou výškou od zemského povrchu dochádza (opäť bez ohľadu na použitú schému konvekcie) nad všetkými 3 regiónmi k zväčšovaniu podhodnotenia \bar{s} na nižších σ hladinách, pričom jeho maximum je dosahované na hladinách σ okolo 0,95 – 0,9. Nad ním sa veľkosť podhodnotenia \bar{s} znižuje (výraznejšie nad západnou a južnou Európou), pričom dochádza dokonca k malému nadhodnoteniu \bar{s} nad západnou a južnou Európou na hladinách σ okolo 0,8. Nad nimi dochádza opäť k miernemu nárastu podhodnotenia \bar{s} a na σ hladinách vyšších ako 0,3 sú rozdiely \bar{s} minimálne. Obdobný priebeh majú aj vertikálne profily rozdielov \bar{s} v lete, ktoré sú zobrazené na obr. 5.10 (e) a (f), pričom amplitúdy medzi podhodnoteniami a nadhodnoteniami \bar{s} sú väčšie ako v zime. Súčasne, oblasti maximálneho nadhodnotenia \bar{s} najmä nad južnou, ale aj východnou Európou sa nachádzajú na vyšších σ hladinách, a to v rozmedzí zhruba 0,8 – 0,65 (v prípade východnej Európy dochádza na rozdiel od zimnej sezóny aj k nadhodnoteniu \bar{s}). Nad nimi dochádza opäť k poklesu nadhodnotenia \bar{s} , potom k následnému prechodu do podhodnotenia \bar{s} (okrem regiónu južnej Európy pri použití Tiedtkeho schémy) a následne k postupnej minimalizácii rozdielov \bar{s} .

Modulácie \bar{s} vyvolané zmenou schémy konvekcie pri zachovaní schémy MVA v zimnej, resp. v letnej sezóne sú zobrazené na obr. 5.10 (c), (d) resp. (g), (h). Z nich je možné konštatovať, že bez ohľadu na použitú schému MVA je \bar{s} v zime i v lete vo väčšej či menšej miere neustále podhodnotená, a to až do hladín σ zhruba v rozmedzí 0,25 – 0,2 v zimnej sezóne, resp. 0,2 – 0,15 v sezóne letnej, nad ktorými sú rozdiely medzi \bar{s} minimálne.

Výsledky pre priemernú sezónnu horizontálnu rýchlosť vetra

Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych horizontálnych rýchlostí vetra v zimnej, resp. v letnej sezóne nad regiónmi Európy sú zobrazené na obr. 5.11, polia rozdielov priemerných sezónnych horizontálnych rýchlostí vetra na hladine $\sigma = 0,995$ v zime, resp. v lete sú zobrazené na obr. 5.8 (ch) – (k), resp. 5.9 (ch) – (k).

Z vertikálnych profilov na obr. 5.11 (a), (b), (e) a (f) je vidieť, že bez ohľadu na použitú schému konvekcie je priemerná sezónna veľkosť horizontálnej rýchlosti vetra, $|\overline{\vec{v}_H}|$, v blízkosti zemského povrchu vo všetkých 3 regiónoch v zimnej (letnej) sezóne podhodnotená (nadhodnotená). Ako je vidieť na obr. 5.8 (ch) a (i), resp. 5.9 (ch) a (i), na hladine $\sigma = 0,995$, t. j. vo výške zhruba 80 m nad zemským povrchom:

- je $|\overline{\vec{v}_H}|$ v zimnej sezóne bez ohľadu na použitú schému konvekcie podhodnocovaná najčastejšie do $0,5 - 1 \text{ m.s}^{-1}$, resp. nahodnocovaná najčastejšie do $1 - 1,5 \text{ m.s}^{-1}$ (k podhodnoteniam výraznejším dochádza napríklad nad oblasťami Álp či Atlantiku, k výraznejším nadhodnoteniam dochádza nad Ukrajinou);
- je $|\overline{\vec{v}_H}|$ v letnej sezóne bez ohľadu na použitú schému konvekcie podhodnocovaná najčastejšie do $0,5 \text{ m.s}^{-1}$, resp. nahodnocovaná najčastejšie do $0,5 - 1 \text{ m.s}^{-1}$ (k podhodnoteniam výraznejším dochádza najmä nad západnými oblasťami Stredozemného mora, k výraznejším nadhodnoteniam dochádza pri použití Tiedtkeho, resp. Grellovej schémy nad Severným morom a nad južnou časťou Pyrenejského polostrova, resp. nad oblasťami Pyrenejského polostrova);
- sú polia rozdielu $|\overline{\vec{v}_H}|$, ako aj polia rozdielu smerov $\overline{\vec{v}_H}$ v zimnej sezóne menej citlivé na výbere schémy konvekcie ako v sezóne letnej.

Z vyššie zmienených vertikálnych profilov je ďalej vidieť, že s rastúcou výškou nad zemským povrchom dochádza v zimnej (letnej) sezóne k strmému (miernemu) nadhodnoteniu $|\overline{\vec{v}_H}|$ nad všetkými regiónymi, ktoré dosahujú maxim na hladinách σ do 0,95. V zimnej sezóne nad nimi s rastúcou výškou veľkosť nadhodnotenia $|\overline{\vec{v}_H}|$ klesá:

- výraznejšie nad západnou a východnou Európou po hladinu zhruba $\sigma = 0,9$, nad ktorou je pokles pozvoľnejší a postupne prechádza najskôr do nevýrazného podhodnotenia a následne do nevýrazného nadhodnotenia v najvyšších hladinách (pri použití Grellovej schémy nad východnou Európou dochádza nad hladinou $\sigma = 0,9$ k opätovnému nárastu nadhodnotenia a následne k jeho postupnému poklesu);
- výraznejšie nad južnou Európou po hladinu zhruba $\sigma = 0,8$, kde prechádza do nevýrazného podhodnotenia $|\overline{\vec{v}_H}|$, ktorého veľkosť sa mení len málo až do navyšších vrstiev, kde dochádza opäť k slabému nadhodnoteniu $|\overline{\vec{v}_H}|$.

V letnej sezóne nad maximom nadhodnotenia $|\overline{\vec{v}_H}|$:

- dochádza pri použití Tiedtkeho schémy k postupnému poklesu nadhodnotenia $|\overline{\vec{v}_H}|$, pričom nad hladinou zhruba $\sigma = 0,7$ začína dochádzať:

- nad južnou a východnou Európou k podhodnocovaniu $\overline{|\vec{v}_H|}$, ktoré sa následne vo vyšších hladinách strieda s nadhodnocovaním $\overline{|\vec{v}_H|}$;
- nad západnou Európou k nadhodnocovaniu $\overline{|\vec{v}_H|}$, pričom to v menšej či väčšej miere pretrváva až po najvyššiu modelovu hladinu;
- dochádza pri použití Grellovej schémy:
 - nad západnou a východnou Európou k malému poklesu nadhodnotenia $\overline{|\vec{v}_H|}$, nad ktorým sa jeho veľkosť takmer vôbec alebo len málo mení až po hladinu zhruba $\sigma = 0,7$, nad ktorou dochádza najskôr k jeho malému zväčšeniu a následnému poklesu;
 - nad južnou Európou k poklesu nadhodnotenia $\overline{|\vec{v}_H|}$ zhruba po hladinu $\sigma = 0,85$, nad ňou dochádza k nárastu podhodnotenia, a to až po hladinu zhruba $\sigma = 0,125$, nad ktorou veľkosť podhodnotenia klesá až po najvyššiu modelovu hladinu.

Modulácie $\overline{|\vec{v}_H|}$ vyvolané zmenou schémy konvekcie pri zachovaní schémy MVA v zimnej, resp. v letnej sezóne sú zobrazené na obr. 5.11 (c) a (d) resp. (g) a (h). Na ich základe je možné konštatovať, že bez ohľadu na použitú schému MVA je $\overline{|\vec{v}_H|}$ v zimnej sezóne od zemského povrchu až po hladiny σ v intervale zhruba 0,65 – 0,45 podhodnotená, pričom:

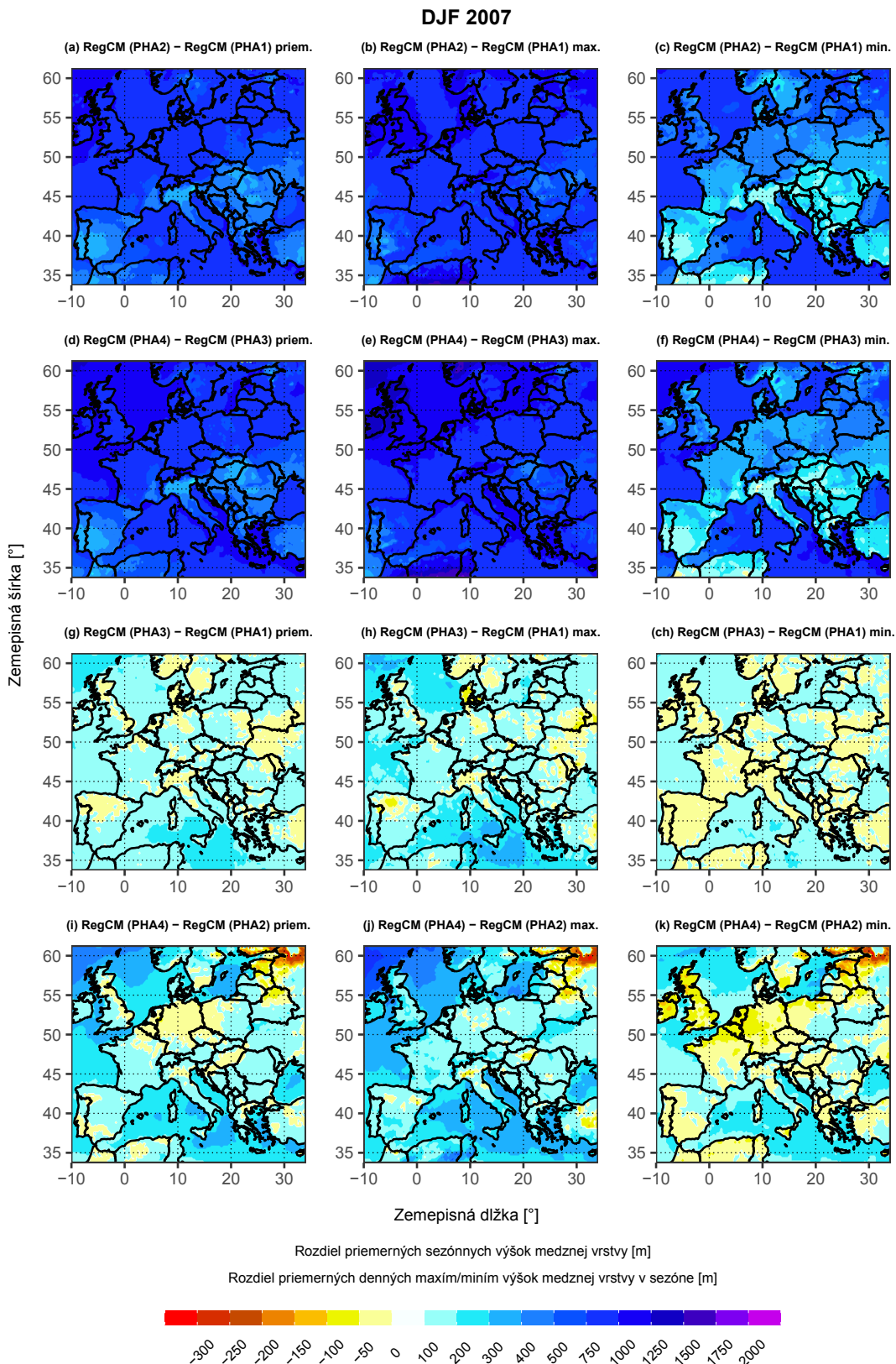
- výšky týchto hladín závisia ako od regiónu (najmenšia je nad južnou Európou, vyššie sú nad Európou západnou a východnou), tak od použitej schémy MVA v simuláciách;
- k najväčšiemu nárastu podhodnotenia dochádza na najnižších hladinách (výraznejší je pritom pri použití Holtslagovej schémy), nad ktorými sa vo väčšine prípadov mení najskôr pozvoľnejšie a následne sa znižuje.

Nad týmito hladinami dochádza naopak k nárastu nadhodnotenia $\overline{|\vec{v}_H|}$, ktoré dosahuje nad všetkými 3 regiónmi maximum okolo hladiny $\sigma = 0,3$, nad ktorým následne nadhodnotenie klesá, pričom k opätovnému podhodnoteniu $\overline{|\vec{v}_H|}$ dochádza len nad regiónom východnej Európy (nad hladinou $\sigma = 0,2$). Obdobne aj v letnej sezóne je bez ohľadu na použitú schému MVA $\overline{|\vec{v}_H|}$ pri zemskom povrchu podhodnotená vo všetkých 3 regiónoch, pričom:

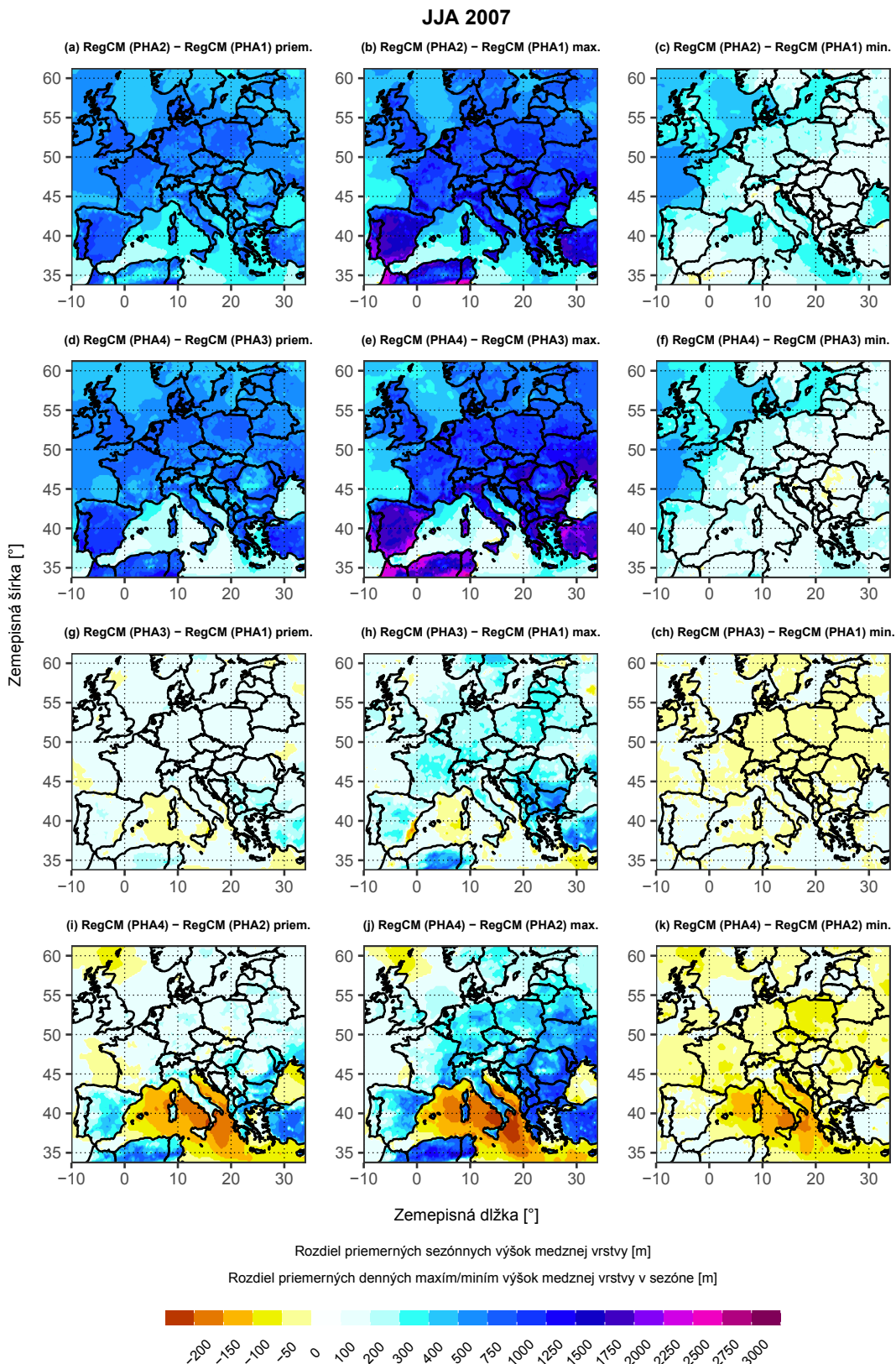
- nad západnou Európou podhodnotenie $\overline{|\vec{v}_H|}$ pretrváva vo väčšej či menšej miere v celom vertikálnom rozsahu a súčasne dosahuje dvoch maxím: k prvému, menej výraznému dochádza na hladine zhruba $\sigma = 0,95$, k druhému, oveľa výraznejšiemu na hladine asi $\sigma = 0,125$ (podobný vertikálny profil je pozorovaný aj nad východnou Európou, avšak s tým rozdielom, že pri použití Holtslagovej schémy dochádza na hladinách σ v intervale zhruba 0,775 – 0,3 k miernemu nadhodnoteniu $\overline{|\vec{v}_H|}$);
- nad južnou Európou najprv podhodnotenie $\overline{|\vec{v}_H|}$ s rastúcou výškou vrastá (pri použití UW, resp. Holtslagovej schémy asi po hladinu $\sigma = 0,825$, resp. $\sigma = 0,775$), následne klesá a postupne prechádza do nadhodnotenia $\overline{|\vec{v}_H|}$, ktoré dosahuje maximum pri použití UW, resp. Holtslagovej schémy asi na hladine $\sigma = 0,125$, resp. $\sigma = 0,075$.

Ako je vidieť na obr. 5.8 (j) a (k), resp. 5.9 (j) a (k), na hladine $\sigma = 0,995$ je:

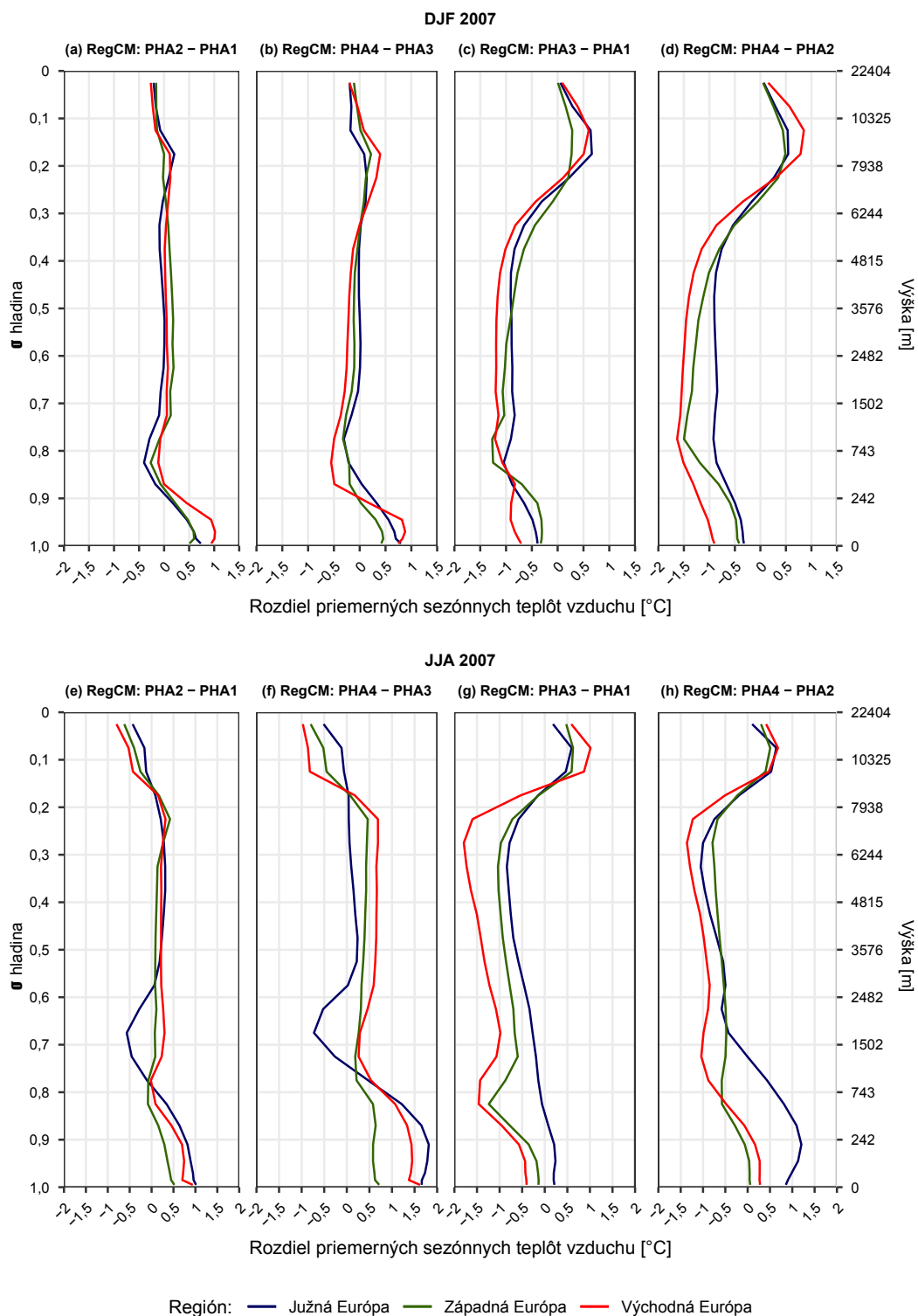
- $|\overline{\vec{v}_H}|$ bez ohľadu na použitú schému MVA v zimnej sezóne podhodnocovaná najčastejšie do $0,5 - 1 \text{ m.s}^{-1}$, resp. nahodnocovaná najčastejšie do 1 m.s^{-1} (k výraznejším podhodnoteniam dochádza nad centrálnou a východnou oblasťou Stredozemného mora, k výraznejším nadhodnoteniam dochádza pri použití UW, resp. Holtslagovej schémy nad oblasťou severne od Veľkej Británie, nad Jadranským a Baltským morom, resp. nad oblasťou severne od Veľkej Británie a nad severnou oblasťou Čierneho mora);
- $|\overline{\vec{v}_H}|$ bez ohľadu na použitú schému MVA $|\overline{\vec{v}_H}|$ v letnej sezóne podhodnocovaná najčastejšie do $0,5 - 1,5 \text{ m.s}^{-1}$, resp. nahodnocovaná najčastejšie do $1 - 2 \text{ m.s}^{-1}$ (k výraznejšiemu podhodnoteniu dochádza najmä nad centrálnou oblasťou Stredozemného mora, k výraznejším nadhodnoteniam dochádza nad západnou oblasťou Stredozemného mora, nad západnou časťou Turecka a nad morami v jej okolí a taktiež nad oblasťou Baltského mora);
- sú polia rozdielu smerov $\overline{\vec{v}_H}$ v zimnej sezóne viac citlivé na výbere schémy MVA ako v sezóne letnej.



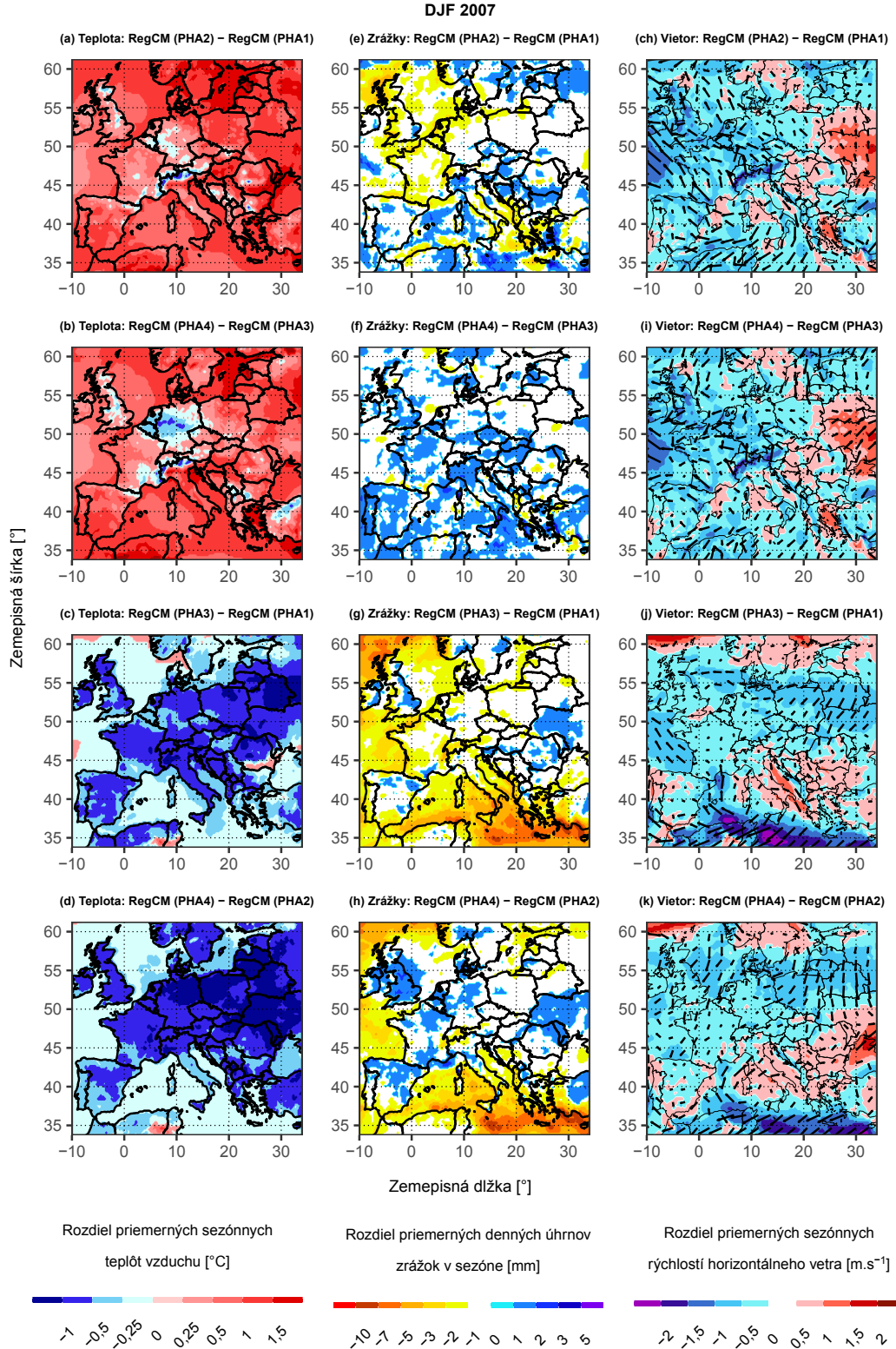
Obrázok 5.5: Polia rozdielu priemerných sezónnych výšok MVA (obr. v ľavom stĺpci) a rozdielu priemerných denných maxim/miním výšky MVA (obr. v prostrednom/pravom stĺpci) v metroch v zimnej sezóne 2007 určené medzi simuláciami: RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2).



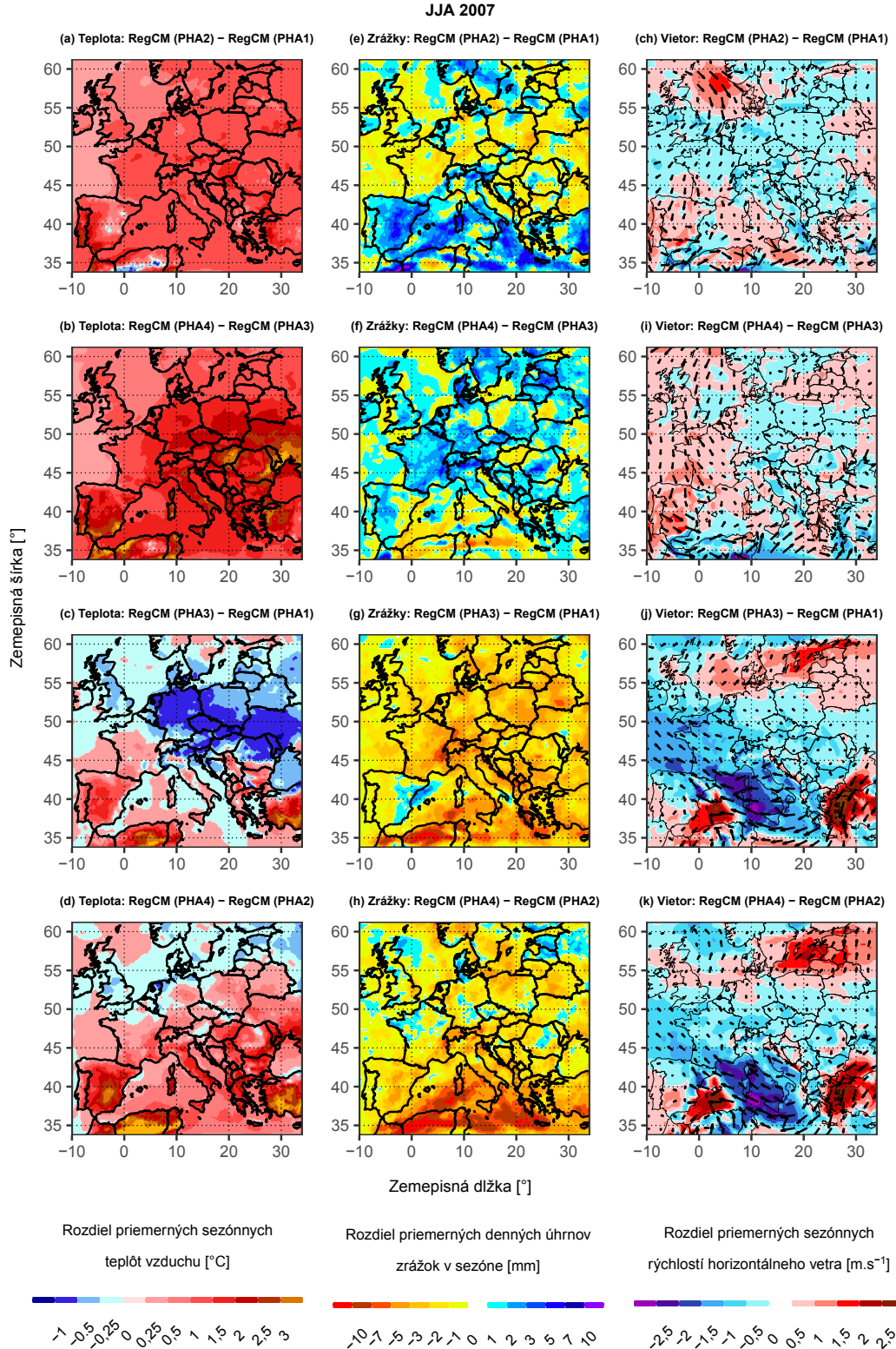
Obrázok 5.6: Polia rozdielu priemerných sezónnych výšok MVA (obr. v ľavom stĺpci) a rozdielu priemerných denných maxim/miním výšky MVA (obr. v prostrednom/pravom stĺpci) v metroch v letnej sezóne 2007 určené medzi simuláciami: RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2).



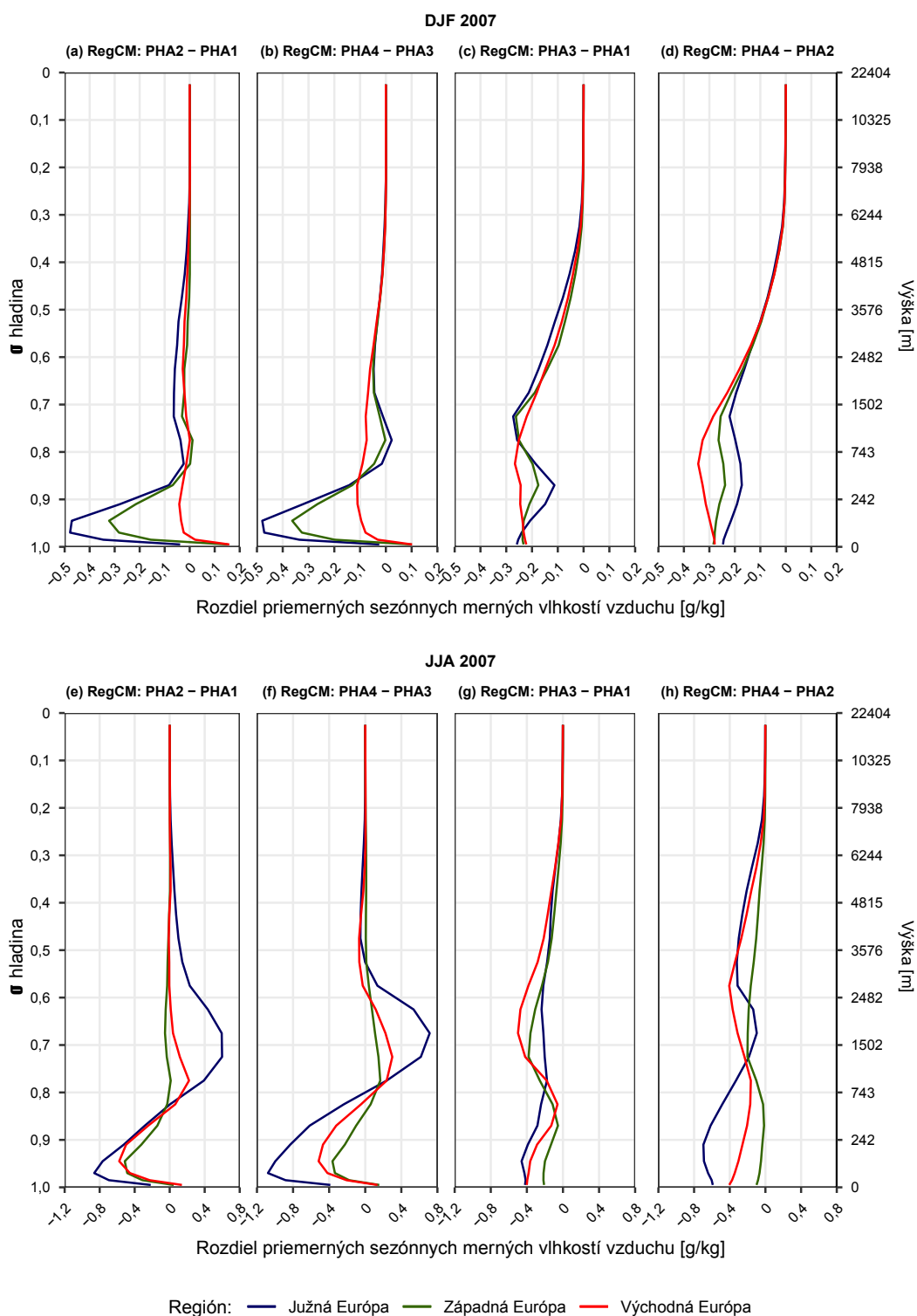
Obrázok 5.7: Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych teplôt vzduchu v °C nad regiónom južnej (modré čiary), západnej (zelené čiary) a východnej (červené čiary) Európy v zimnej (DJF)/letnej (JJA) sezóne 2007 určené medzi simuláciami: RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2). Geografické vymedzenie regiónov Európy je uvedené v tab. 5.2.



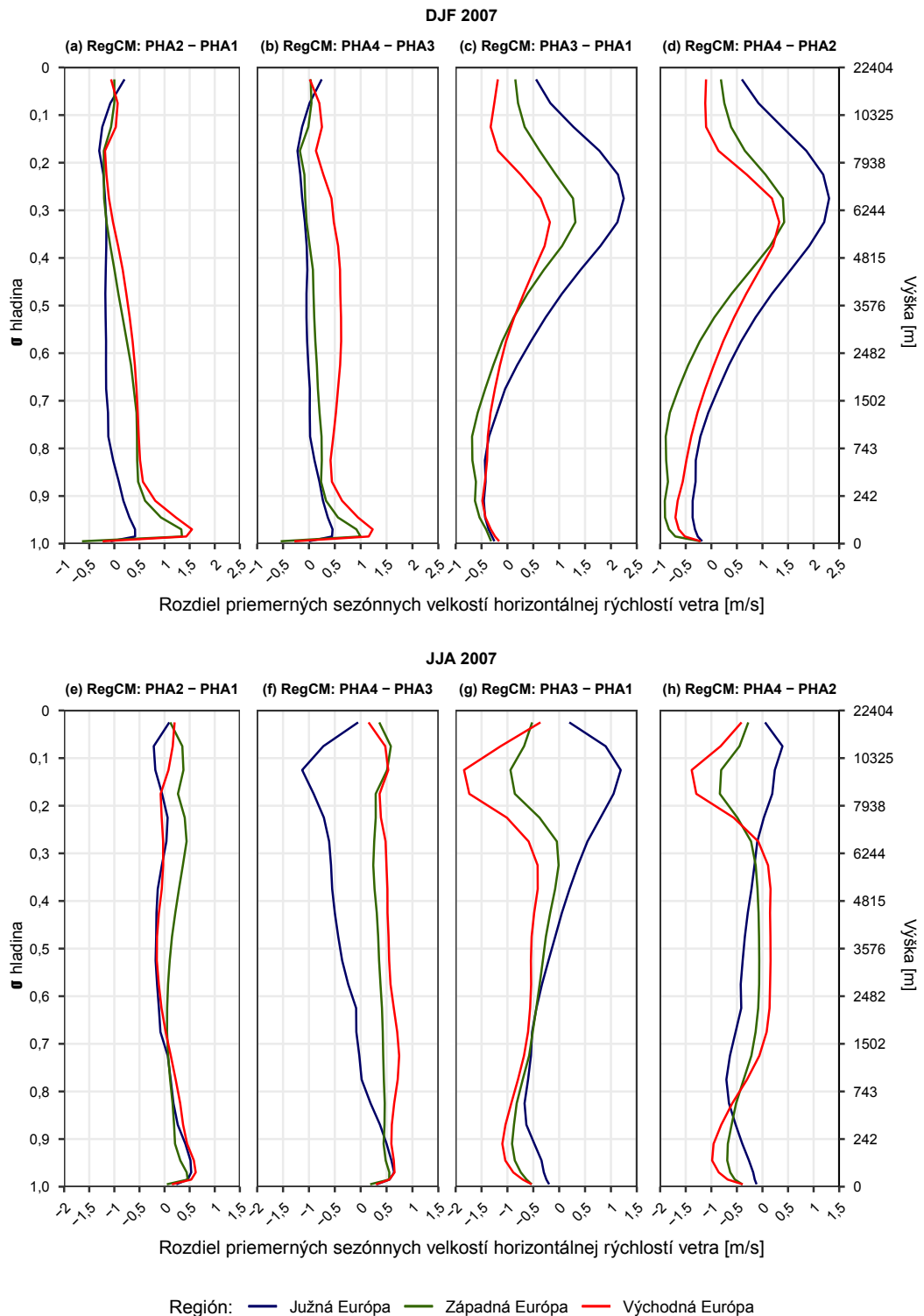
Obrázok 5.8: Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vzduchu v 2 m nad zemským povrchom v °C, obr. (a) – (d), priemerných denných úhrnov zrážok v mm, obr. (e) – (h), a priemerných sezónnych rýchlostí horizontálneho vetra v m.s⁻¹ na vertikálnej hladine $\sigma = 0,995$, obr. (ch) – (k), v zimnej sezóne 2007 určené medzi simuláciami: RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2).



Obrázok 5.9: Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vzduchu v 2 m nad zemským povrchom v °C, obr. (a) – (d), priemerných denných úhrnov zrážok v mm, obr. (e) – (h), a priemerných sezónnych rýchlostí horizontálneho vetra v m.s⁻¹ na vertikálnej hladine $\sigma = 0,995$, obr. (ch) – (k), v letnej sezóne 2007 určené medzi simuláciami: RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2).



Obrázok 5.10: Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych merných vlhkostí vzduchu v $\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ nad regiónom južnej (modré čiary), západnej (zelené čiary) a východnej (červené čiary) Európy v zimnej (DJF)/letnej (JJA) sezóne 2007 určené medzi simuláciami: RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2). Geografické vymedzenie regiónov Európy je uvedené v tab. 5.2.



Obrázok 5.11: Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych veľkostí rýchlosti horizontálneho vetra v $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ nad regiónom južnej (modré čiary), západnej (zelené čiary) a východnej (červené čiary) Európy v zimnej (DJF)/letnej (JJA) sezóne 2007 určené medzi simuláciami: RegCM (PHA2) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA3), RegCM (PHA3) a RegCM (PHA1), RegCM (PHA4) a RegCM (PHA2). Geografické vymedzenie regiónov Európy je uvedené v tab. 5.2.

6. Chemicko-transportné simulácie modelom CAMx 6.50

V tejto kapitole je najskôr stručne popísaný spôsob, akým boli skonštruované chemicko-transportné simulácie pomocou modelu CAMx 6.50. Následne sú analyzované dopady zmien riadiacich meteorologických polí na zmeny koncentrácií ozónu, oxidu dusičitého a siričitého a jemnej frakcie aerosólových častíc, PM_{2,5}. Na záver sú výsledky simulácií chemizmu porovnané so staničnými meraniami, v prípade oxidu dusičitého aj s družicovými dátami.

6.1 Zhotovenie simulácií

Simulácie chemizmu a transportu boli realizované *offline* prepojením modelov CAMx 6.50 a RegCM 4.6 sprostredkovaným preprocesorom RegCM2CAMx. Samotný popis a funkcia preprocesa, ako aj postup realizácie tohto typu simulácií boli pritom podrobne popísané v kapitole 4. Rovnako v nej boli popísané aj všetky potrebné nastavenia modelu CAMx 6.50, ktoré boli pri jeho behoch v práci použité, ako sú: chemické mechanizmy (CB05, ISSOROPIA, SOAP 2.1 a CF modul), parametrizácie suchej depozície (Zhang a kol., 2001, 2003) a mokrej depozície (Seinfeld a Pandis, 1998), ako aj numerické metódy, pomocou ktorých boli jednotlivé členy sústavy Eulerových rovníc riešené.

Simulácie modelom CAMx 6.50 bežali na identickej horizontálnej sieti, ktorá bola použitá v simuláciách modelom RegCM 4.6, pričom vo vertikálnom smere bolo použitých 18 vrstiev s identickou štruktúrou najnižších 18 vrstiev, ktorá bola použitá v simuláciách modelom RegCM 4.6. Výber tejto štruktúry siete pritom vychádza z práce Huszára a kol. (Huszar a kol., 2020).

V rámci prípravy vstupných dát boli preprocesorom RegCM2CAMx vytvorené riadiace meteorologické polia z výstupov všetkých 4 testovacích simulácií RegCM (PHA1) – RegCM (PHA4). Okrem nich bolo k behu CHTM nutné vytvoriť počiatočnú a okrajové chemické podmienky, ako aj polia emisií, pričom tieto dáta (polia interpolované do vyššie popísanej siete) mi boli poskytnuté vedúcim práce. Z tohto dôvodu bola v simuláciách použitá identická štruktúra siete ako vo vyššie zmienenej práci, kde je možné nájsť taktiež ich podrobný popis. Stručne, k tvorbe počiatočnej a okrajových chemických podmienok Huszar a kol. (2020) použili dáta z výstupov globálneho CHTM MOZART-4 (Emmons a kol., 2010), polia antropogénnych emisií (konkrétne pre NO_x, SO₂, CO, ROL, PM_{2,5} a PM₁₀) pripravili z databázy TNO-MAC-III (MACC-III Final Report, 2016). Dáta emisií BROL (do simulácií boli zahrnuté emisie izoprénu a monoterpénov) mi boli taktiež poskytnuté vedúcim práce. Tieto emisie sú závislé od meteorologických podmienok a boli zhotovené modelom MEGAN (verzie 2.1) (Guenther a kol., 2012) pre každú simuláciu RegCM (PHA1) – RegCM (PHA4) zvlášť.

Pomocou všetkých týchto vstupov boli napokon zrealizované 4 simulácie pre rok 2007, ktoré sú v práci označené ako CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4), kde číslo x v názve simulácie CAMx (PHA x) označuje, z ktorej simulácie RegCM (PHA x) boli vytvorené riadiace meteorologické polia v nej použité. Okrajové podmienky boli počas simulácií menené s frekvenciou 6 hodín a emisie s frekven-

ciou 1 hodiny (pripravené boli emisným preprocesorom FUME (*Flexible Universal Processor for Modeling Emissions*; www.fume-ep.org). Model bol nastavený tak, aby poskytoval hodinové výstupy priemerných koncentrácií polutantov, ktoré boli ukladané v NetCDF-4 súboroch pre jednotlivé dni simulácie.

6.2 Analýza simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)

Predmetom analýzy simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) je štúdium dopadov zmien riadiacich meteorologických polí na zmeny koncentrácií ozónu, oxidu dusičitého, oxidu siričitého a $PM_{2,5}$ * v zimnej a v letnej sezóne. Analýza je pritom analogická tej, ktorá bola použitá pri štúdiu klimatických prvkov v predchádzajúcej kapitole, a teda spočíva v porovnávaní:

- vertikálnych profilov plošného priemeru sezónnej koncentrácie jednotlivých polutantov nad regiónmi západnej, východnej a južnej Európy,
- polí priemernej sezónnej koncentrácie jednotlivých polutantov vo vybraných modelových vrstvách,

vypočítaných zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4), ktoré boli riadené meteorologickými poliami vytvorenými zo simulácií RegCM (PHA1) – RegCM (PHA4) s rovnakou parametrizáciou:

- konvekcie, pričom je vždy študovaný rozdiel medzi výsledkami zo simulácie riadenej dátami, ktoré boli vytvorené zo simulácie s Holtslagovou schémou a výsledkami zo simulácie riadenej dátami, ktoré boli vytvorené zo simulácie s UW schémou, t. j. rozdiel medzi CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), resp. medzi CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3);
- MVA, pričom je vždy študovaný rozdiel medzi výsledkami zo simulácie riadenej dátami, ktoré boli vytvorené zo simulácie s Grellovou schémou a výsledkami zo simulácie riadenej dátami, ktoré boli vytvorené zo simulácie s Tiedtkeho schémou, t. j. rozdiel medzi CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), resp. medzi CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).

6.2.1 Metodika konštrukcie polí a vertikálnych profilov

Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií jednotlivých polutantov medzi každou z vyššie uvedených dvojíc simulácií boli zhotovené pre 5 z 18 modelových vrstiev (1., 3., 5., 7. a 9. vrstvu smerom od zemského povrchu) ako rozdiel polí ich priemernej sezónnej koncentrácie v príslušnej vrstve medzi simuláciami. Polia priemernej sezónnej koncentrácie plyných polutantov (O_3 , NO_2 a SO_2) boli s výnimkou 1. modelovej vrstvy spočítané ako aritmetické priemery polí ich priemernej hodinovej koncentrácie (vyjadrenej v ppmv), ktoré pokrývajú danú

*Koncentrácia $PM_{2,5}$ reprezentuje v práci súčet celkovo 12 koncentrácií rôznych druhov aerosólov, konkrétne: sulfátov, nitrátov, amónnych solí, primárneho elementárneho uhlíka, ostatných druhov jemných primárnych anorganických aerosólov, POA, SOA1, SOA2, SOA3, SOA4, SOPA a SOPB (význam posledných 7 uvedených druhov bol popísaný v podkapitole 4.1.2).

sezónu. V prípade $PM_{2,5}$ boli najskôr sčítané polia priemerných hodinových koncentrácií všetkých 12 druhov aerosólov (vyjadrených v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) a až z tohto súčtu boli vypočítané priemerné sezónne koncentrácie. Pre potreby validácie simulácií boli polia priemernej hodinovej koncentrácie plyných polutantov v 1. modelovej vrstve najskôr prevedené z jednotiek ppmv do jednotiek $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (prenásobením konštantou*) a následne z nich boli vypočítané priemerné sezónne koncentrácie.

Vertikálne profily rozdielu plošného priemeru sezónnej koncentrácie jednotlivých polutantov boli zhotovené analogickým postupom ako vertikálne profily rozdielov klimatických prvkov, ktorý bol popísaný v podkapitole 5.3.1. Všetky výpočtové operácie s dátami boli pritom zrealizované pomocou skriptov vytvorených v Bashi, v ktorých boli použité funkcie zo softvéru CDO.

6.2.2 Výsledky analýzy

S cieľom vytvoriť si predstavu o priestorovom rozložení priemernej sezónnej koncentrácie[†] jednotlivých polutantov v blízkosti zemského povrchu (t. j. v 1. modelovej vrstve, ktorej priemerná hrúbka v priebehu roka je asi 80 m) v zimnej/letnej sezóne 2007 boli zhotovené ich polia, ktoré sú popísané na začiatku každej z nasledujúcich statí. Súčasne, pre vytvorenie predstavy o výškovej závislosti plošných priemerov sezónnej koncentrácie jednotlivých polutantov nad regiónmi Európy v zime/lete 2007 boli zhotovené ich vertikálne profily, pričom v nasledujúcich statiach sú prezentované výsledky zo simulácie CAMx (PHA1). Po ich popise nasleduje zhrnutie výsledkov samotnej analýzy, v ktorom je dôraz kladený hlavne na popísanie najvýraznejších dopadov, keďže študovaná doména je pomerne rozsiahla.

Výsledky analýzy pre priemerné koncentrácie ozónu

Z porovnania polí priemernej koncentrácie ozónu v blízkosti zemského povrchu (obr. 6.1) medzi zimnou a letnou sezónou je evidentné, že vo všetkých štyroch prípadoch sú uvedené priemery nad väčšinou územia vyššie v sezóne letnej, čo je, avšak, očakávaný výsledok, keďže množstvo vznikajúceho ozónu je výrazne závislé od intenzity slnečného žiarenia, od teploty vzduchu, ako aj od emisií BROL, pričom všetky tri faktory sú prirodzene vyššie v sezóne letnej. Súčasne, pri porovnaní polí vypočítaných z jednotlivých simulácií v rámci jednotlivých sezón je vidieť, že k markantnejším rozdielom dochádza v sezóne zimnej, o čom bude

*Hodnoty v práci použitých konštánt sú: 2000 pre O_3 , 1880 pre NO_2 a 2620 pre SO_2 a boli prevzaté z internetovej stránky: https://www2.dmu.dk/AtmosphericEnvironment/Expost/database/docs/PPM_conversion.pdf. Na tomto mieste je však nutné dodať, že veľkosť týchto konštánt je okrem molárnej hmotnosti plynu závislá nepriamoúmerne od teploty vzduchu a priamoúmerne od tlaku vzduchu, čo je možné nahliadnúť z odvodenia prevodu jednotiek, ktoré vychádza z definície jednotky ppmv a predpokladu platnosti stavovej rovnice ideálneho plynu. Hodnoty tu uvedených konštánt platia pre štandardné podmienky, t. j. pre tlak 1013,25 hPa a teplotu 298,15 K. Použitie hodnôt konštánt pri štandardných podmienkach k prevodu koncentrácií v rámci celého roka s dobrým priblížením je možné opodstatniť tým, že neistota modelových výsledkov je spravidla vyššia ako rozsah hodnôt týchto konštánt daný rozsahom teploty a tlaku vzduchu.

[†]V rámci analýzy sú priemerné sezónne koncentrácie ďalej označované len ako priemerné koncentrácie. Obdobne, pri popise vertikálnych profilov sú plošné priemery sezónnej koncentrácie ďalej označované tiež len ako priemerné koncentrácie.

podrobnejšie pojednané nižšie. V poliach je taktiež viditeľná závislosť priemernej koncentrácie od polohy regiónov spojených s významnými emisiami prekursorov ozónu (NO_x , ROL), ako sú napríklad: Benelux, Porúrie, Pádska nížina, Anglicko, juh Poľska, ako aj veľké aglomerácie (Londýn, Paríž, Madrid a ďalšie), kde sú jej hodnoty nižšie ako v oblastiach okolitých a odlahlých (moria, Atlantický oceán a horské oblasti).

Vertikálne profily priemernej koncentrácie ozónu, zobrazené na obr. 6.2 (a), vykazujú v zime nad všetkými 3 regiónmi nárast s výškou (výraznejší od zemského povrchu do výšky asi 2,5 km), pričom vôbec k najvýraznejšiemu z nich v celom profile dochádza nad východnou Európou (zhruba 50 ppbv) a naopak k najmenej výraznému nad západnou Európou (zhruba 38 ppbv). V letnej sezóne dochádza v najnižších vrstvách k pozvoľnému nárastu priemernej koncentrácie nad všetkými 3 regiónmi, zhruba vo výškách 500 – 2000 m sa takmer nemení či dokonca mierne klesá (nad západnou a východnou Európou) a následne už len rastie. Najnižšie, resp. najvyššie hodnoty sú pritom v celom profile dosahované nad západnou, resp. nad južnou Európou.

Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií ozónu v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.3 (a), resp. (b); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.3 (c), resp. (d). Najvýraznejšie dopady zmien riadiacích polí na priemerné koncentrácie v zimnej sezóne sú v oboch prípadoch evidentné nad všetkými 3 regiónmi v nižších vrstvách, pričom spoločným rysom všetkých profilov v tejto oblasti je ich najväčšie nadhodnotenie[†] nad zemským povrchom, ktoré s rastúcou výškou postupne klesá do nevýrazného podhodnotenia (okrem regiónu východnej Európy v prípade druhého porovnania, nad ktorým je oblasť podhodnotenia výraznejšia). Výšky nad zemským povrchom, pri ktorých dochádza k uvedeným prechodom, sa v oboch prípadoch líšia v závislosti od regiónov: nad západnou Európou sú zhruba 1,5 km, resp. 800 m v 1., resp. v 2. prípade; nad južnou Európou asi 1,5 km, resp. 1,75 km a nad východnou Európou asi 750 m, resp. 800 m. Nad nimi dochádza v 1. prípade len k nevýrazným zmenám profilov asi do výšky 6,5 km, nad ktorou podhodnotenie najskôr vzrastá, dosahuje maxima vo výške asi 7,25 km a následne klesá, až napokon prejde do nadhodnotenia. V prípade druhom dochádza nad uvedenými výškami k podobnému priebehu profilov okrem vyššie zmieneného regiónu východnej Európy, kde podhodnotenie narastá asi do výšky 1,25 km, nad ktorou sa postupne znižuje a následne sa chová podobne ako v prípade prvom. V sezóne letnej sú priebehy profilov výrazne odlišné od tých v sezóne zimnej: vyznačujú sa nadhodnotením až do vyšších modelových vrstiev s výnimkou regiónu južnej Európy, nad ktorým dochádza k výraznému poklesu nadhodnotenia a k následnému prechodu do podhodnotenia už v stredných vrstvách. Presnejšie, smerom

[†]Nadhodnotením/podhodnotením (priemernej koncentrácie) pri porovnávaní výsledkov zo simulácií CAMx (PHA x), ktoré boli riadené meteorologickými poliami vytvorenými zo simulácií RegCM (PHA x) s rovnakou schémou konvekcie, je v rámci analýzy mienené, že priemerná koncentrácia je vyššia/nížšia v simulácii CAMx (PHA x), ktorá bola riadená dátami vytvorenými zo simulácie s Holtslagovou schémou. Obdobne, nadhodnotením/podhodnotením (priemernej koncentrácie) pri porovnávaní výsledkov zo simulácií CAMx (PHA x), ktoré boli riadené meteorologickými poliami vytvorenými zo simulácií RegCM (PHA x) s rovnakou schémou MVA, je mienené, že priemerná koncentrácia je vyššia/nížšia v simulácii CAMx (PHA x), ktorá bola riadená dátami vytvorenými zo simulácie s Grellovou schémou.

od zemského povrchu dochádza v prípade oboch porovnaní nad všetkými 3 regiónmi najskôr k miernemu poklesu nadhodnotenia v najnižších vrstvách (zhruba do 250 m nad južnou a východnou Európou a do 500 m nad západnou Európou), nad ktorými nadhodnotenie vrstá do maxima vo výške asi 1,75 km (2,25 km nad východnou Európou v 2. porovnaní). V prvom porovnaní nad ním postupne dochádza oscilujúcim spôsobom k celkovému poklesu nadhodnotenia nad západnou a východnou Európou, k následnému prechodu do podhodnotenia vo výške asi 8,25 km, ktoré dosahuje maximum vo výške asi 8,5 km a ďalej sa znižuje, až prejde opäť do nadhodnotenia (nad južnou Európou, ako bolo zmienené vyššie, je pokles nad maximom nadhodnotenia strmší, do podhodnotenia prejde vo výške zhruba 3,75 km, nad ktorou sa zvlí medzi podhodnotením a nadhodnotením a vo výškách nad asi 6,5 km je už len podhodnotený s maximom vo výške približne 8,5 km). V 2. porovnaní dochádza nad maximom nadhodnotenia vo východnej Európe taktiež oscilujúcim spôsobom k celkovému poklesu nadhodnotenia, ktoré avšak neprechádza do podhodnotenia, ako tomu je v porovnaní prvom; v západnej Európe nad ním dochádza k pozvoľnému poklesu nadhodnotenia, ktoré zhruba vo výške 7,75 km prechádza do podhodnotenia a v južnej Európe nad ním dochádza k podobnému priebehu ako v 1. porovnaní.

Pretože vertikálne profily reprezentujú plošné priemery priemernej koncentrácie nad pomerne veľkými oblasťami, v ktorých sa jej hodnoty medzi sebou spravidla významne odlišujú, ako je vidieť napríklad na obr. 6.1, je prirodzene vhodnejšie posudzovať dopady zmien riadiacích polí na výsledné priemerné koncentrácie hlavne pomocou polí ich rozdielov*. Polia rozdielu priemerných koncentrácií ozónu v 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.4 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.4 (b), resp. (d). Podobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.6 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.6 (e) – (h), resp. (i) – (o). V zimnej sezóne je v najnižšej modelovej vrstve evidenté nadhodnotenie priemernej koncentrácie takmer nad celou študovanou oblasťou v oboch prípadoch (o trochu výraznejšie nad väčšinou oblastí v 1. prípade) s výnimkou pár oblastí nad vodnými plochami, kde je naopak podhodnotená do $2 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. K obzvlášť výraznému nadhodnoteniu (nad $14 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) dochádza napríklad nad oblasťami Pádskej nížiny, povodia Dunaja v južnom Rumusku (resp. v okolí Bukurešti v 2. porovnaní), v okolí Barcelony (i Madridu v 2. porovnaní) v Španielsku, naopak nad odľahlejšími vodnými plochami od pevniny v Stredozemnom mori a v Atlantickom oceáne a nad vysokohorskými oblasťami (najmä nad Pyrenejami a nad oblasťami Álp) je nadhodnotenie najmenšie. V 3. modelovej vrstve, ktorá v sezónnom priemere siaha do výšky zhruba 313 m (hodnoty priemerných sezónnych výškok, do ktorých vyššie hladiny zasahujú, sú uvedené v obrázkoch), zotráva v oboch prípadoch nadhodnotenie priemernej koncentrácie takmer nad celou študovanou oblasťou (výnimkami sú napríklad oblasti nad Alpami či oblasť nad severozápadným Španielskom, kde je naopak nevýrazne podhodnotená). Vo vrstvách vyšších už dochádza k výskytu oblastí s podhodnotením priemernej koncentrácie, ktorých poloha, veľkosť plochy

*Z tohto dôvodu, ako aj z dôvodu, že všetky vertikálne profily sú v práci zobrazené, nepokladám za nutné ich ďalej v texte popisovať až tak detailne, ako tomu bolo vyššie.

i podhodnotenia sa mení, a to v závislosti od porovnávaných simulácií, tak aj od výšky hladín. V 5. vrstve (siahajúcej v priemere zhruba do výšky 889 m) sa v prípade oboch porovnaní nachádzajú nad oblasťami Veľkej Británie, Severného či Baltského mora, pričom výraznejšie sú v prípade druhom. Ďalej sú takmer výhradne sústredené nad pevninou: v prípade prvom najmä nad Balkánskym polostrovom a nad oblasťami strednej a východnej Európy, v prípade druhom najmä v pásme zhruba $45^\circ - 55^\circ$ severnej zemepisnej šírky. V 7. vrstve (siahajúcej v priemere zhruba do výšky 1688 m) sa oproti 5. vrstve v oboch prípadoch spravidla zväčšujú oblasti s podhodnotením priemernej koncentrácie a znižuje sa veľkosť jej nadhodnotenia v oblastiach nad Stredozemným morom. V 9. vrstve (siahajúcej v priemere zhruba do výšky 2667 m) voči 7. vrstve pretrvávajú zmenšovanie nadhodnotených oblastí nad Stredozemným morom, nad pevninou sa spravidla znižuje veľkosť podhodnotenia priemernej koncentrácie v podhodnotených oblastiach a opäť pribúdajú oblasti s jej miernym nadhodnotením. V letnej sezóne je pri oboch porovnaníach v najnižšej modelovej vrstve priemerná koncentrácia nad väčšinou študovanej oblasti nadhodnotená, no spravidla nie až do tak výraznej miery ako v sezóne zimnej (najčastejšie do $2 - 6 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$). Zároveň sa v nich vyskytuje väčší počet oblastí, kde je naopak priemerná koncentrácia podhodnotená: v prvom porovnaní najmä nad vodnými plochami (napr. v pobrežných oblastiach severnej Afriky), v prípade druhého porovnania sa okrem oblastí nad vodnými plochami (napr. nad Biskajským zálivom či nad západnými časťami Stredozemného mora) vyskytujú aj nad pevninou (napr. nad oblasťami Pádskej nížiny, Nemecka, Francúzska či Poľska). Vo vyšších vrstvách v oboch prípadoch taktiež dominujú nadhodnotenú oblasti, pričom veľkosť nadhodnotenia v nich od 3. po 7. vrstvu (nad východnou Európou v 2. porovnaní až po 9. vrstvu) spravidla vzrastá a práve v tejto vrstve dosahuje maximálnych hodnôt (s výnimkami oblastí na okrajoch študovanej oblasti), čo je prirodzene v súlade s vyššie popísanými maximami nadhodnotení vertikálnych profilov nad všetkými tromi regiónmi Európy. Výskyt podhodnotených oblastí vo vyšších vrstvách závisí (podobne ako v sezóne zimnej) od porovnávaných simulácií, tak aj od výšky hladín. V 3. vrstve sú v prípade 1. porovnania prítomné napríklad nad Madarskom, oblasťami Rakúska, Slovenska, v druhom prípade napríklad nad oblasťami Pádskej nížiny, Biskajského zálivu, Francúzska, Nemecka, Poľska či nad oblasťami Stredozemného mora. V 5. vrstve sú výraznejšie pri 2. porovnaní, pričom ich poloha zodpovedá zhruba polohe v 3. vrstve (s výnimkou oblastí východného a južného Francúzska a oblastí v Stredozemnom mori, kde sa už nevyskytujú), pri 1. porovnaní sa nachádzajú napríklad nad východnou časťou Pádskej nížiny či v oblasti Viedne. V 7. vrstve sa podhodnotenú oblasti nevyskytujú s výnimkou okrajových oblastí pri 1. porovnaní. V 9. vrstve dochádza opäť k ich výskytu, ktorý je výraznejší v 1. porovnaní a to najmä v južných okrajoch študovanej oblasti.

Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií ozónu v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.3 (e), resp. (f); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.3 (g), resp. (h). Súhrnne je z nich možné konštatovať, že pri oboch porovnaníach sú v oboch sezónach priemerné koncentrácie v nižších vrstvách nad všetkými 3 regiónmi nadhodnotenú (výraznejšie v sezóne letnej). Tieto nadhodnotenia, rôznym spôsobom modulované v závislosti od regiónu a od porovnávaných simulácií,

majú s rastúcou výškou tendenciu celkovo klesať a prechádzať do podhodnotení v nižších výškach v sezóne letnej (2,5 – 3 km) ako v sezóne zimnej (4,5 – 6,5 km; s výnimkou regiónu južnej Európy v 1. prípade, nad ktorým k podhodnocovaniu nedochádza, ale naopak nadhodnotenie nad nižšími vrstvami v ňom s výškou postupne celkovo vzrastá). Vo výške nad 6,5 km pri oboch porovnaníach a v oboch sezónach podhodnotenia klesajú a prechádzajú do nadhodnotení s výnimkou regiónu východnej Európy v zimej sezóne pri 1. porovnaní, kde podhodnotenie síce klesá, no neprechádza do nadhodnotenia.

Polia rozdielu priemerných koncentrácií ozónu v 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.5 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.5 (b), resp. (d). Obdobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.7 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.7 (e) – (h), resp. (i) – (o). V zimnej sezóne je v najnižšej modelovej hladine v oboch prípadoch evidentná prítomnosť niekoľkých oblastí, kde je priemerná koncentrácia viac podhodnotená (prekračujúc $1,5 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$): najrozsiahlejšie z nich sú v 1. prípade centrovane nad oblasťou Holandska a Porúria (táto oblasť siaha až nad východ Anglicka), Rumuska a východného Bieloruska, v prípade druhom sa rozprestierajú nad centrálnym Anglickom, nad pásmom siahajúcim od Beleneluxu až do Českej republiky a nad Maďarskom. Naopak, k výraznejšiemu nadhodnoteniu priemernej koncentrácie (prekračujúcemu $2 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) dochádza v oboch prípadoch nad oblasťou medzi Severným a Baltským morom, v prípade prvom i nad oblasťami Álp a Stredozemného mora. V 3. modelovej vrstve je situácia v oboch prípadoch veľmi podobná ako vo vrstve najnižšej. V 5. vrstve dochádza najmä k zániku vyššie popísaných podhodnotených oblastí nad západnou a centrálnou Európou (v 2. prípade ich zopár pretrváva, no vo výrazne zredukovanej podobe) a naopak k zväčšovaniu podhodnotených oblastí vo východnej časti domény v oboch prípadoch. V 7. vrstve sú oblasti podhodnotenia vo východnej časti domény voči ich polohe v 5. vrstve v oboch prípadoch odklonené východným smerom, navyše dochádza ku vzniku (prehlbovaniu) podhodnotených oblastí v oblastiach západnej Európy, napríklad nad západným Nemeckom či nad južnou oblasťou Severného mora (nad južným Francúzskom). V 9. vrstve oproti 7. vrstve dochádza väčšinou k znižovaniu podhodnotených oblastí nad východnou časťou domény a k rozšíreniu podhodnotených oblastí do centrálnej Európy, ktoré je výraznejšie v 2. prípade. Oblasti, kde je naopak priemerná koncentrácia nadhodnotená, majú tendenciu s výškou zväčša mohutnieť po 5. vrstvu a následne sa znižovať. Pri porovnaní polí medzi zimnou a letnou sezónou v najnižšej hladine je v oboch prípadoch v letnej sezóne evidentný väčší výskyt nadhodnotených oblastí, k výraznejšiemu podhodnoteniu (prevyšujúcemu $2 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) dochádza len v 1. prípade a to nad oblasťami severného Turecka, Čierneho a Egejského mora. V prípade 1. porovnania prevládajú oblasti s nadhodnotením aj vo vyšších vrstvách, konkrétne od 3. po 7. vrstvu, v ktorých navyše s rastúcou výškou dochádza aj k znižovaniu podhodnotenej oblasti v juhovýchodnej časti domény či k postupnému nárastu podhodnotených oblastí v severozápadnej časti domény. Výrazný rozdiel nastáva v 9. vrstve, kde naopak dominujú podhodnotené oblasti. V prípade 2. porovnania dominujú nadhodnotené oblasti vo všetkých 4 výškových vrstvách, podhodnotené

oblasti sa vyskytujú napríklad v oblastiach nad Holandskom a Porúriím, nad západnými Alpami či nad Severným morom v 3. i v 5. vrstve (podobne ako vo vrstve najnižšej). V 7. vrstve je veľkosť podhodnotenia v týchto oblastiach nad pevninou spravidla najmenšia, poprípade zanikajú (napríklad nad Holandskom a Porúriím). V 9. vrstve dochádza naopak k nárastu podhodnotených oblastí, ktorý však nie je tak markantný ako v prípade 1. porovnania.

Výsledky analýzy pre priemerné koncentrácie oxidu dusičitého

Polia priemernej koncentrácie oxidu dusičitého v blízkosti zemského povrchu (obr. 6.8) názorne reflektujú oblasti späté s jeho najväčšími emisiami, ktoré boli zmienené už v predchádzajúcej stati. Z ich porovnania medzi zimnou a letnou sezónou je možné konštatovať, že vo všetkých štyroch prípadoch sú uvedené priemery nad väčšinou územia vyššie v sezóne zimnej. Pri porovnaní polí určených z jednotlivých simulácií v rámci jednotlivých sezón je vidieť, že k výraznejším rozdielom dochádza v zime (rovnako ako v prípade ozónu), o čom bude podrobnejšie pojednané nižšie. Vertikálne profily, zobrazené na obr. 6.2 (b), poukazujú na rýchly pokles priemernej koncentrácie oxidu dusičitého v zime i v lete nad všetkými 3 regiónmi Európy.

Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií oxidu dusičitého v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.9 (a), resp. (b); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.9 (c), resp. (d). Spoločným rysom všetkých profilov v oboch porovnaníach a v oboch sezónach je maximálne podhodnotenie (výraznejšie v sezóne zimnej) nad zemským povrchom. To s rastúcou výškou rýchlo klesá, prechádza do nevýrazného nadhodnotenia, ktoré sa postupne znižuje, v dôsledku čoho je v stredných a vo vyšších vrstvách rozdiel priemerných koncentrácií zanedbateľný. Výnimkou z pravidla je profil nad regiónom južnej Európy v 2. prípade v letnej sezóne, ktorý už tesne nad povrchom sklesne do malého nadhodnotenia, následne sa vráti do podhodnotenia a ďalej sa chová vyššie popísaným spôsobom.

Polia rozdielu priemerných koncentrácií oxidu dusičitého v 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.10 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.10 (b), resp. (d). Obdobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.12 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.12 (e) – (h), resp. (i) – (o). Celkovo je možné v najnižšej modelovej vrstve v oboch prípadoch počas zimnej sezóny konštatovať podhodnotenie priemernej koncentrácie oxidu dusičitého nad väčšinou európskej pevniny (menej výrazné v oblastiach hôr a v oblastiach s menším zaľudnením), ako aj nad morami, ktoré k nej tesne priliehajú, resp. sú ňou dostatočne uzavreté (Baltské, Jadranské, Egejské či Čierne more) a naopak jej nadhodnotenie v oblastiach nad severnou Afrikou, nad Stredozemným morom i nad Atlantickým oceánom západne od Francúzska. V sezóne letnej je v nej podhodnotenie v oboch prípadoch nad väčšinou európskej pevniny menšie (najčastejšie do $1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), no v niektorých odľahlých regiónoch (najmä vo vysokohorských) je priemerná koncentrácia naopak slabo nadhodnotená (do $1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$). Rovnako sú nadhodnotené

aj oblasti nad Čiernym či Stredozemným morom (tie sú plošne rozsiahlejšie voči zimnej sezóne), ako aj nad Atlantikom. Pri porovnaní týchto výsledkov s tými pre priemerné koncentrácie ozónu je nad mnohými oblasťami evidentná záporná korelácia, t. j. čím je priemerná koncentrácia ozónu viac nadhodnotená, tým je priemerná koncentrácia oxidu dusičitého viac podhodnotená a naopak (poukazujuúc na titráciu ozónu). Ako príklady týchto oblastí počas zimnej sezóny, nad ktorými je táto korelácia obzvlášť výrazná v oboch porovnaníach, je možné zmieniť Pádsku nížinu či povodie Dunaja v južnom Rumusku (resp. okolie Bukurešti v 2. porovnaní), kde podhodnotenie priemernej koncentrácie prekračuje $7 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, ďalej napríklad oblasti Madridu, Barcelony, Beneluxu, severného Francúzska, Porúria či východného Anglicka; v sezóne letnej napríklad oblasti nad Beneluxom, východným Anglickom a oblasťou Severného mora medzi nimi. Polia rozdielu priemerných koncentrácií v 3. a v 5. vrstve sa v zimnej sezóne zreteľne odlišujú: kým v 3. vrstve dominujú najmä podhodnotenú oblasti, v 5. vrstve už zväčša nad pevninou prevládajú oblasti s nadhodnotením (podhodnotenú oblasti zotrývajú vo väčšej miere nad vodnými plochami i niektorými oblasťami pevniny v ich okolí). V 7. vrstve dochádza najmä k rapídneho poklesu podhodnotených oblastí nad vodnými plochami a k celkúmu zmenšeniu amplitúdy medzi nadhodnotenými a podhodnotenými oblasťami. V 9. vrstve dochádza k zväčšovaniu plôch podhodnotených oblastí, ktorých polohy sa líšia v závislosti od porovnávaných simulácií. V letnej sezóne je viditeľný v oboch prípadoch nárast nadhodnotených oblastí nad pevninami už od 3. vrstvy, v ktorej navyše dochádza k výraznému nárastu podhodnotených oblastí nad Stredozemným morom. V 5. vrstve je v oboch porovnaníach evidentný pokles podhodnotenia v pásme tiahnucom sa od Anglicka nad Poľsko, v 1. prípade dochádza taktiež k nárastu podhodnotených oblastí nad centrálnou Európou, nad Balkánom či Ukrajinou. V 7. a v 9. vrstve dominujú nadhodnotenú oblasti (najčastejšie do 0,1 ppbv).

Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií oxidu dusičitého v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.9 (e), resp. (f); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.9 (g), resp. (h). V zimnej sezóne je z nich možné v oboch prípadoch konštatovať podhodnotenie priemernej koncentrácie v najnižších vrstvách nad východnou a nad južnou Európou (dosahujúce maximum nad zemským povrchom), ktoré s rastúcou výškou prechádza do nadhodnotenia, ktoré sa ďalej minimalizuje. V regióne západnej Európy je naopak v oboch prípadoch priemerná koncentrácia nad zemským povrchom nadhodnotená, no s rastúcou výškou rýchlo klesne do podhodnotenia a následne sa chová podobne ako vo zvyšných regiónoch. V sezóne letnej je možné konštatovať v oboch prípadoch nadhodnotenie priemernej koncentrácie nad zemským povrchom v západnej a vo východnej Európe (výraznejšie v 2. prípade), ktoré s rastúcou výškou rýchlo klesá do podhodnotenia, následne sa vracia do nadhodnotenia, ktoré sa ďalej už len minimalizuje. V regióne južnej Európy je priemerná koncentrácia nad zemským povrchom podhodnotená, postupne prechádza do nadhodnotenia, ktoré sa tiež s výškou minimalizuje. Vhodné je však upozorniť na to, že amplitúdy týchto modulácií sú o rád menšie ako v profiloch rozdielu priemerných koncentrácií medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).

Polia rozdielu priemerných koncentrácií oxidu dusičitého v 1. modelovej vrstve

v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.11 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.11 (b), resp. (d). Obdobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.13 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.13 (e) – (h), resp. (i) – (o). V najnižšej modelovej vrstve je v oboch prípadoch i sezónach vidieť (výraznejšie v lete), že nad väčšinou domény sú rozdiely malé a to väčšinou do $\pm 0,5 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. Obdobne je najmä v zimnej sezóne zjavná záporná korelácia medzi väčšinou oblastí s väčšími rozdielmi priemerných koncentrácií oxidu dusičitého a ozónu, ktoré boli popísané pri analogickom porovnaní simulácií v predchádzajúcej stati. Vo vyšších vrstvách, konkrétne v 3. a v 5., sú polia v oboch sezónach výrazne nehomogénne a líšia sa v závislosti od porovnania. V 7. vrstve dochádza k nárastu nadhodnotených oblastí, ktorých plochy sa ešte viac zväčšujú v 9. vrstve.

Výsledky analýzy pre priemerné koncentrácie oxidu siričitého

Polia priemernej koncentrácie oxidu siričitého v blízkosti zemského povrchu (obr. 6.14) poukazujú na oblasti späté s jeho najväčšími emisiami, ktoré sa vyskytujú najmä v oblastiach centrálnej a východnej Európy, na Balkánskom polostrove či v Turecku. Z ich porovnania medzi sezónou zimnou a letnou je vidieť, že vo všetkých štyroch prípadoch sú uvedené priemery nad väčšinou územia vyššie v sezóne zimnej. Pri porovnaní polí určených z jednotlivých simulácií v rámci jednotlivých sezón je vidieť, že k výraznejším rozdielom dochádza v zime (rovnako ako v prípade ozónu či oxidu dusičitého), o čom bude podrobnejšie pojednané nižšie. Vertikálne profily, zobrazené na obr. 6.2 (c), poukazujú na to, že kým v zimnej i v letnej sezóne dochádza nad regiónom západnej Európy s rastúcou výškou k poklesu priemernej koncentrácie od zemského povrchu, nad regiónmi východnej a južnej Európy dochádza najskôr k jej nárastu (zhruba do výšky 500 m) a až následne k jej poklesu s rastúcou výškou.

Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií oxidu siričitého v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.15 (a), resp. (b); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.15 (c), resp. (d). Spoločným rysom všetkých profilov v oboch porovnaníach a v oboch sezónach je podhodnotenie priemernej koncentrácie v najnižších vrstvách prechádzajúce postupne do nadhodnotenia, ktoré sa s výškou minimalizuje (s výnimkou profilu nad východnou Európou v 1. porovnaní, ktorý prechádza znovu do podhodnotenia, ktoré sa následne minimalizuje). Zaujímavou črtou profilov vo všetkých prípadoch nad východnou a južnou Európou je počiatočný nárast podhodnotenia do výšky zhruba 500 m.

Polia rozdielu priemerných koncentrácií oxidu siričitého v 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.16 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.16 (b), resp. (d). Obdobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.18 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na

obr. 6.18 (e) – (h), resp. (i) – (o). Z polí v najnižšej vrstve je zreteľne vidieť, že k najmarkantnejším rozielom dochádza v sezóne zimnej nad lokálnymi oblasťami na Balkánskom polostrove a v Turecku, kde podhodnotenia, ale aj nadhodnotenia presahujú $11 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; oblasti nad centrálnou Európou (najmä nad Poľskom a Českou republikou), Nemeckom, Beneluxom či východným Anglickom sú spravidla podhodnotené, no v menšej miere ($2 - 9 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$); na zvyšku domény sú rozdiely najčastejšie do $1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, pričom oblasti nadhodnotené sa nachádzajú najmä nad Škandináviou, oblasťami Stredozemného a Baltského mora a Atlantiku. V sezóne letnej sú oblasti s väčšími rozdielmi podstatne zredukované (nachádzajú sa opäť najmä nad Tureckom a Balkánom), na zvyšku domény sú rozdiely opäť najčastejšie do $1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. Súčasne, v oboch sezónach je evidentná závislosť podhodnotení, resp. nadhodnotení od porovnávaných simulácií. V 3. vrstve je situácia v oboch porovnaníach i sezónach podobná tej vo vrstve najnižšej. V 5. vrstve je v zime evidentný rapidný pokles nadhodnotených oblastí v oboch prípadoch, v sezóne letnej je ich rozsah taktiež redukovaný (výraznejšie v 2. porovnaní), no nie až do takej miery ako v zime. V 7. vrstve dominujú v oboch prípadoch v zime nadhodnotené oblasti takmer nad celou doménou, v lete pretrvávajú redukcia podhodnotených oblastí. V 9. vrstve voči vrstve 7. dochádza v oboch prípadoch v zime k znižovaniu veľkosti nadhodnotenia (v 1. porovnaní i k nárastu slabo podhodnotených oblastí), v lete dochádza k zániku, poprípade k redukcii podhodnotených oblastí v juhovýchodnej časti domény a nad Pyrenejským polostrovom (v 1. porovnaní i k nárastu slabo podhodnotených oblastí najmä nad severnou, centrálnou a východnou časťou domény).

Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií oxidu siričitého v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.15 (e), resp. (f); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.15 (g), resp. (h). Z nich je vidieť, že nad regiónom západnej Európy dochádza vo všetkých prípadoch k poklesu malého nadhodnotenia pri zemskom povrchu a následnému prechodu do podhodnotenia, ktoré sa s výškou minimalizuje. Nad regiónom východnej a južnej Európy sú priemerné koncentrácie pri zemskom povrchu vo všetkých prípadoch podhodnotené. Veľkosti týchto podhodnotení s výškou spočiatku vzrastajú (najmenej výrazne nad južnou Európou v zime v 2. porovnaní), s výnimkou 1. porovnaní v letnej sezóne postupne prechádzajú do nevýrazných nadhodnotení, ktoré sa ďalej minimalizujú (v 1. porovnaní v lete dochádza s rastúcou výškou priamo k minimalizácii podhodnotení).

Polia rozdielu priemerných koncentrácií oxidu siričitého v 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.17 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.17 (b), resp. (d). Obdobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.19 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.19 (e) – (h), resp. (i) – (o). Z polí v najnižšej modelovej hladine je možné konštatovať, že nad väčšinou domény sú diferencie priemernej koncentrácie v oboch sezónach i prípadoch do $\pm 1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; k najväčším rozdielom dochádza najmä nad lokálnymi oblasťami na Balkáne a v Turecku, kde nadhodnotenia, resp. podhodnotenia presahujú v zime 3, resp. $5 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ a podhodnotenia v lete (najmä

v 1. prípade) ešte hodnôt vyšších. Rozloženie podhodnotených, resp. nadhodnotených oblastí v 3. vrstve je v oboch prípadoch i sezónach obdobné tým vo vrstve najnižšej. Od 5. do 9. vrstvy je evidentný postupný pokles amplitúdy medzi nadhodnotenými a podhodnotenými oblasťami (výraznejší v sezóne zimnej) a taktiež zmena ich polôh, ktorá sa opäť mení v závislosti ako od sezóny, tak aj od porovnávaných simulácií.

Výsledky analýzy pre priemerné koncentrácie PM_{2,5}

Z polí priemernej koncentrácie PM_{2,5} v blízkosti zemského povrchu (obr. 6.20) je vidieť, že jej vyššie hodnoty sú v zimnej i v letnej sezóne dosahované najmä nad nížinatými oblasťami Európy (v zime obzvlášť v centrálnej Európe, na severe Balkánu, v okolí Kyjeva či v Pádskej nížine; v lete hlavne v oblastiach Beneluxu, Porúria, Milána či Kyjeva) a naopak hodnoty nižšie nad horskými oblasťami, nad morami a nad oceánom. Vertikálne profily, zobrazené na obr. 6.2 (d), poukazujú na rýchly pokles priemernej koncentrácie s výškou v nižších vrstvách nad všetkými tromi regiónmi Európy v zimnej sezóne i na to, že v sezóne letnej je tento pokles o trochu pozvolnejší. Ďalej je z nich vidieť, že najvyššia, resp. najnižšia priemerná koncentrácia nad zemským povrchom je v oboch sezónach dosahovaná nad východnou, resp. západnou Európou.

Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií PM_{2,5} v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.21 (a), resp. (b); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.21 (c), resp. (d). Spoločným rysom všetkých profilov s rastúcou výškou v oboch porovnaníach i v oboch sezónach je pokles podhodnotenia, ktoré dosahuje maximum práve nad zemským povrchom, prechod do nadhodnotenia (vo vyšších výškach v sezóne letnej), ktoré sa ďalej minimalizuje.

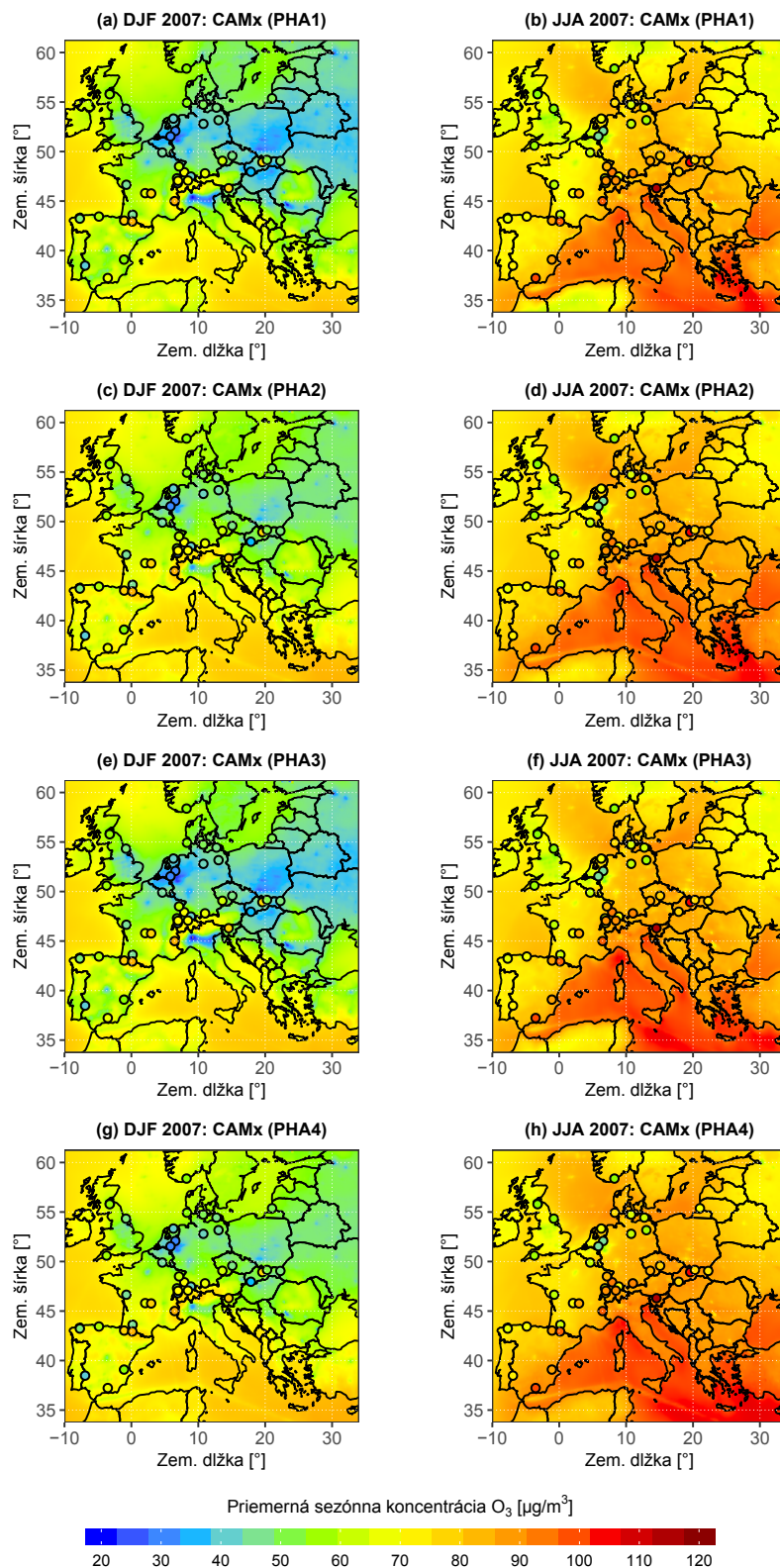
Polia rozdielu priemerných koncentrácií PM_{2,5} v 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.22 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.22 (b), resp. (d). Obdobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.24 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.24 (e) – (h), resp. (i) – (o). V 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne je možné konštatovať markantnejšie podhodnotenia priemernej koncentrácie najmä nad nížinatými oblasťami na severe Balkánskeho polostrova (oblasť povodia Dunaja v južnom Rumusku, vo Vojvodine v Srbsku či v oblasti Záhrebu v Chorvátsku), nad Maďarskom a prilahlými zníženými oblasťami či nad Pádskou nížinou, pričom polohy týchto oblastí sú závislé od porovnávaných simulácií. Naopak, nad vyššími horstvami (Alpy, Pyreneje, časti Karpát), nad morami a nad oceánom sú diferencie priemernej koncentrácie spravidla do $\pm 1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. V 3. vrstve sa voči vrstve najnižšej v oboch prípadoch zväčšujú nadhodnotené oblasti, ktoré v 5. vrstve už dominujú nad väčšinou európskej pevniny, ako aj vodných plôch v severnej časti domény. V 7. vrstve sú oblasti nadhodnotené takmer nad celou doménou, v 9. vrstve sú prítomné slabo podhodnotené oblasti, a to najmä v 1. porovnaní. V letnej sezóne je priemerná koncentrácia v najnižšej vrstve podhodnotená takmer nad celou doménou v oboch prípadoch: výraznejšie však v 2. prípade, kde pod-

hodnotenia v oblastiach Beneluxu a Milána presahujú $7 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. V 3. i v 5. vrstve dominujú stále podhodnotené oblasti nad väčšinou domény, i keď veľkosť podhodnotenia sa v nich spravidla znižuje. V 7. vrstve dochádza v oboch prípadoch k rapidnému nárastu nahodnotených oblastí: v 1. prípade nad mnohými oblasťami pevniny, ktoré ležia na sever od 45. rovnobežky, no taktiež nad oblasťami v juhovýchodnej časti domény; v 2. prípade nad oblasťami Veľkej Británie, Severného mora, Škandinávie, Álp, Karpát a ďalších. V 9. vrstve nadhodnotené oblasti dominujú v 2. prípade takmer nad celou doménou, v 1. prípade ich plocha voči 7. vrstve vzrastá v juhovýchodnom i juhozápadnom smere.

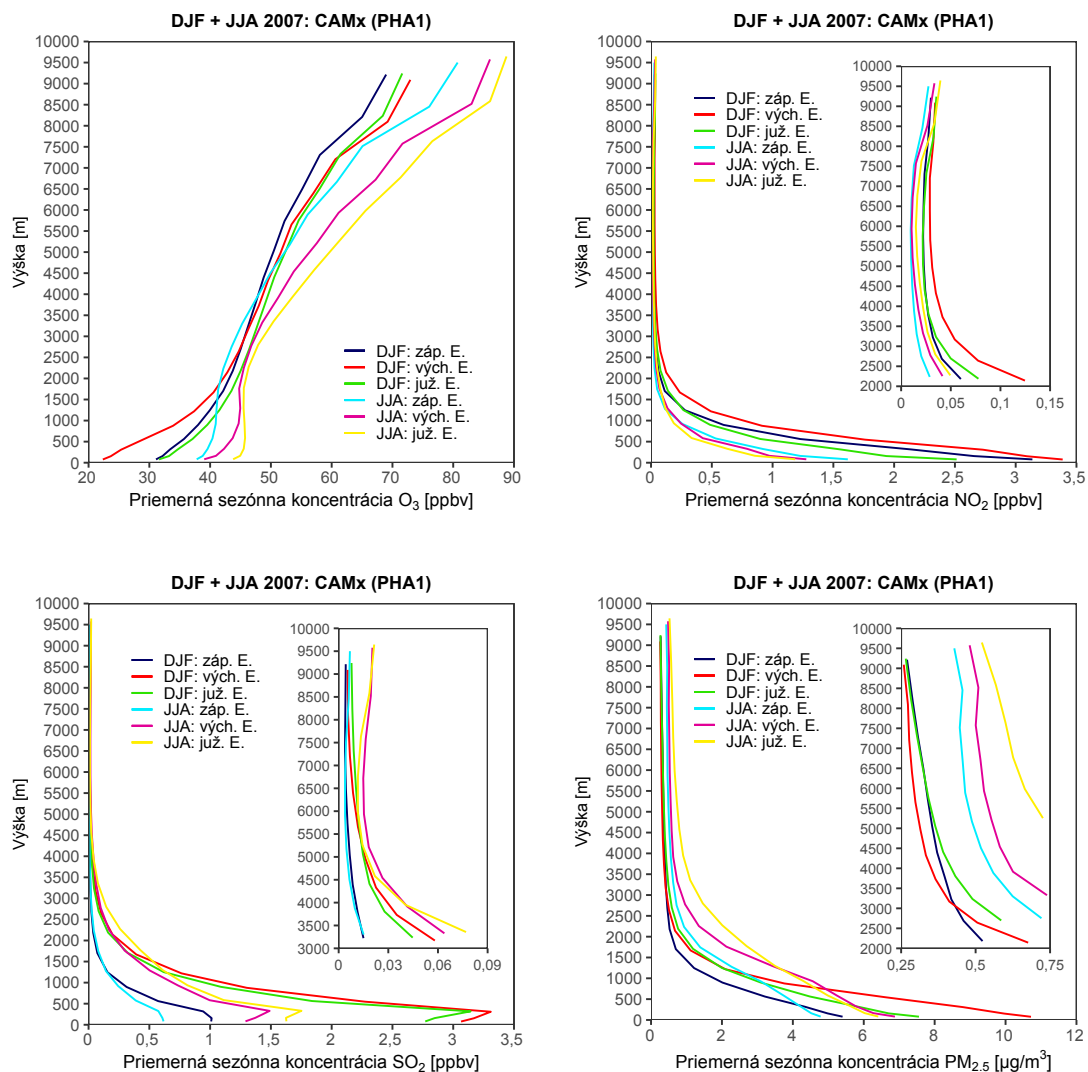
Vertikálne profily rozdielu priemerných koncentrácií $\text{PM}_{2,5}$ v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.21 (e), resp. (f); analogické profily v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.21 (g), resp. (h). V zimnej sezóne je vidieť, že k výraznejším moduláciám profilov dochádza do výšky zhruba 3,5 km v 1. prípade, resp. 4 km v 2. prípade, nad ktorou sú diferencie priemerných koncentrácií zanedbateľné. Nad regiónom západnej Európy je pritom v oboch prípadoch priemerná koncentrácia nadhodnotená v celom tomto rozsahu: v 1. prípade veľkosť nadhodnotenia od zemského povrchu spočiatku klesá, následne vzrastá, no vo výške asi 1,75 km začne opäť klesať; v 2. prípade veľkosť nadhodnotenia od zemského povrchu iba klesá. Vo východnej Európe je priemerná koncentrácia v oboch prípadoch nad zemským povrchom podhodnotená (výraznejšie v 2. prípade), s rastúcou výškou prechádza do nadhodnotenia, ktoré sa postupne minimalizuje. V južnej Európe je priemerná koncentrácia nad zemským povrchom v 1. prípade takmer rovnaká v oboch simuláciách, s rastúcou výškou dochádza najskôr k nárastu jej nadhodnotenia, ktoré sa postupne znižuje. V 2. prípade je priemerná koncentrácia nad zemským povrchom v južnej Európe mierne podhodnotená, no s rastúcou výškou prechádza do nadhodnotenia, ktoré sa postupne minimalizuje. V sezóne letnej je priemerná koncentrácia v oboch prípadoch nad všetkými regiónmi nadhodnotená v celom vertikálnom rozsahu, no najvýraznejšie vo vrstvách nižších a stredných (nad zemským povrchom sú vo všetkých regiónoch nadhodnotenia vyššie v 1. prípade). Nadhodnotenie priemernej koncentrácie v 1. prípade nad všetkými regiónmi zhruba do výšky 1 km najskôr klesá (pozvoľnejšie nad južnou Európou), následne vzrastie (výraznejšie nad východnou Európou) a ďalej už len klesá. V 2. prípade sú profily voči tým v 1. prípade akoby natiahnuté smerom do vyšších vrstiev.

Polia rozdielu priemerných koncentrácií $\text{PM}_{2,5}$ v 1. modelovej vrstve v zimnej sezóne medzi simuláciami CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1) v prípade prvom, resp. medzi simuláciami CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2) v prípade druhom sú zobrazené na obr. 6.23 (a), resp. (c); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.23 (b), resp. (d). Obdobné polia vo vyšších modelových vrstvách v zimnej sezóne sú v prípade prvom, resp. druhom zobrazené na obr. 6.25 (a) – (d), resp. (ch) – (k); analogické polia v sezóne letnej sú zobrazené na obr. 6.25 (e) – (h), resp. (i) – (o). Polia v najnižšej vrstve sa zreteľne odlišujú ako medzi sezónami, tak aj medzi sebou v rámci sezón: v sezóne letnej sú priemerné koncentrácie rôznym spôsobom nadhodnotené (výraznejšie v 1. prípade) nad väčšinou domény (s výnimkou niekoľkých oblastí na okrajoch domény); v sezóne zimnej sú nad doménou prítomné oblasti výraznejších nadhodnotení i podhodno-

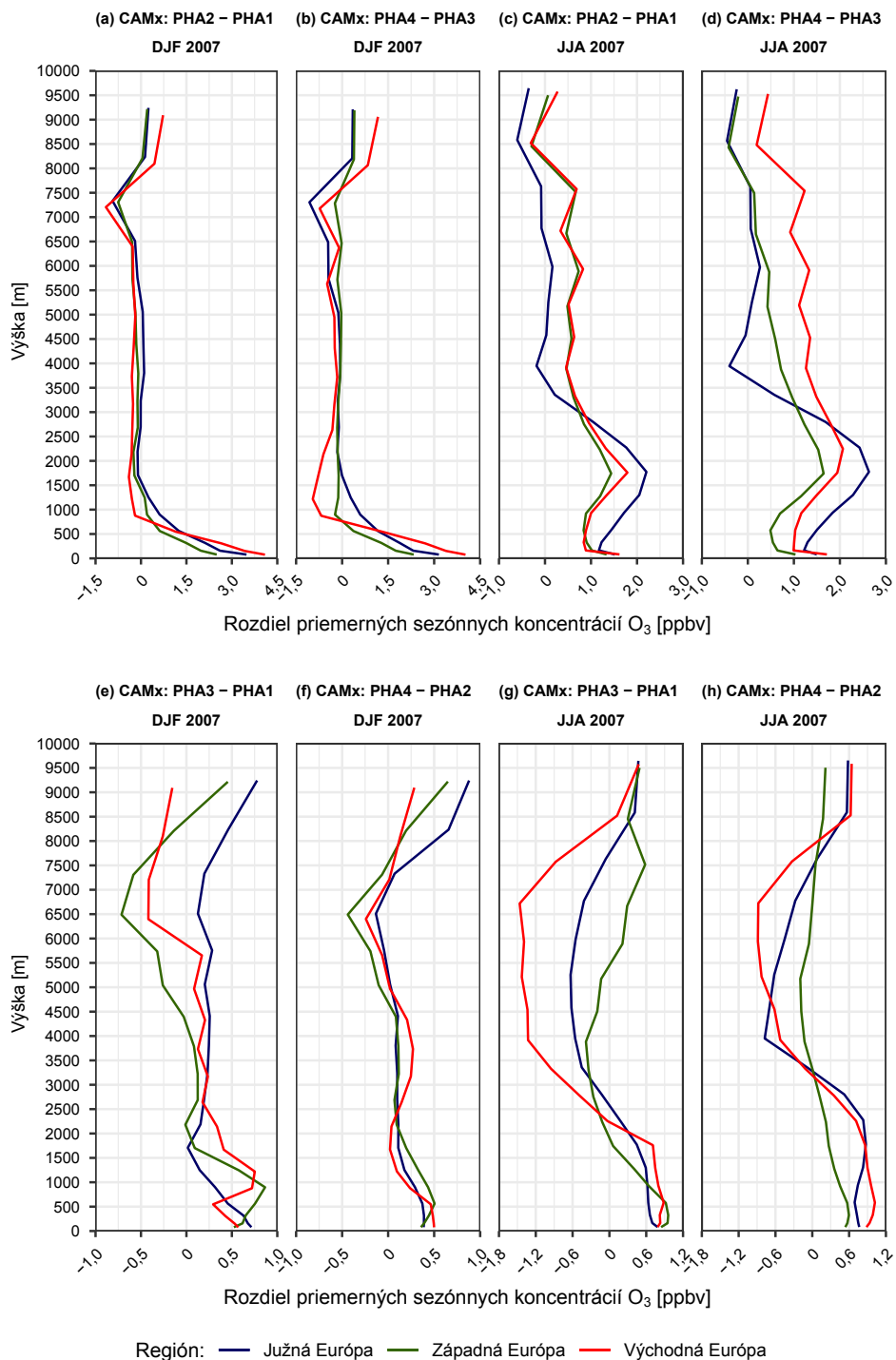
tení, ktorých polohy sa odlišujú v jednotlivých prípadoch. Konkrétne, výraznejšie podhodnotené oblasti sa v zimnej sezóne vyskytujú v 1. prípade napríklad nad západnou časťou Pádskej nížiny, nad severnou oblasťou Bosny a Hercegoviny, nad oblasťami Holandska a Porúria či nad oblasťami v okolí Karpát; v 2. prípade najmä nad oblasťou tiahnucou sa od Beneluxu cez Nemecko po západnú polovicu Českej republiky. Naopak, výraznejšie podhodnotené oblasti sa v 1. prípade vyskytujú napríklad nad nížinatými oblasťami Balkánskeho polostrova, nad oblasťou východne od Dánska či nad Českou republikou; v 2. prípade najmä v pásme tiahnucom sa od Baltského mora, cez Poľsko, Ukrajinu po Čierne more, no taktiež nad Pádskou nížinou. V sezóne letnej sú výraznejšie nahodnotené oblasti (lokálne i o viac ako $3,5 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) v 1. prípade sústredené v pásme tiahnucom sa od Biskajského zálivu, cez severnú polovicu Francúzska, Benelux a severozápad Nemecka až po Jutský polostrov; nad Pádskou nížinou; v pásme tiahnucom sa od centrálneho Poľska, cez východné Slovensko a Maďarsko nad západné Bulharsko; no taktiež v oblastiach Bieloruska, Ukrajiny, či južného pobrežia Turecka. S výnimkou oblastí nad východnou Európou (Bielorusko, Ukrajina) a okolím Turecka sa nadhodnotené oblasti v 2. prípade nachádzajú nad podobnými lokalitami ako v 1. prípade. Od 3. do 5. vrstvy je v zimnej sezóne v 1. porovnaní vidieť nárast podhodnotených oblastí nad západnou Európou, Poľskom či Bieloruskom a naopak ich pokles nad Balkánským polostrovom, východnou Ukrajinou, Čiernym morom a Tureckom; v 2. porovnaní je vidieť napríklad rozrastanie nadhodnotených oblastí nad Poľskom a Ukrajinou a taktiež pokles veľkosti podhodnotenia v podhodnotených oblastiach. V 7. vrstve dochádza voči 5. vrstve k rapídному úbytku podhodnotených oblastí v oboch porovnaníach. V 9. vrstve je voči 7. vrstve vidieť v oboch prípadoch najmä znižovanie amplitúdy diferencií priemernej koncentrácie. V letnej sezóne dochádza v oboch prípadoch od 3. vrstvy smerom do vyšších vrstiev k úbytku podhodnotených oblastí (výraznejšie v 2. prípade) a taktiež k postupnému znižovaniu veľkosti nadhodnotenia, a to s rýchlejšou tendenciou v západnej polovici domény.



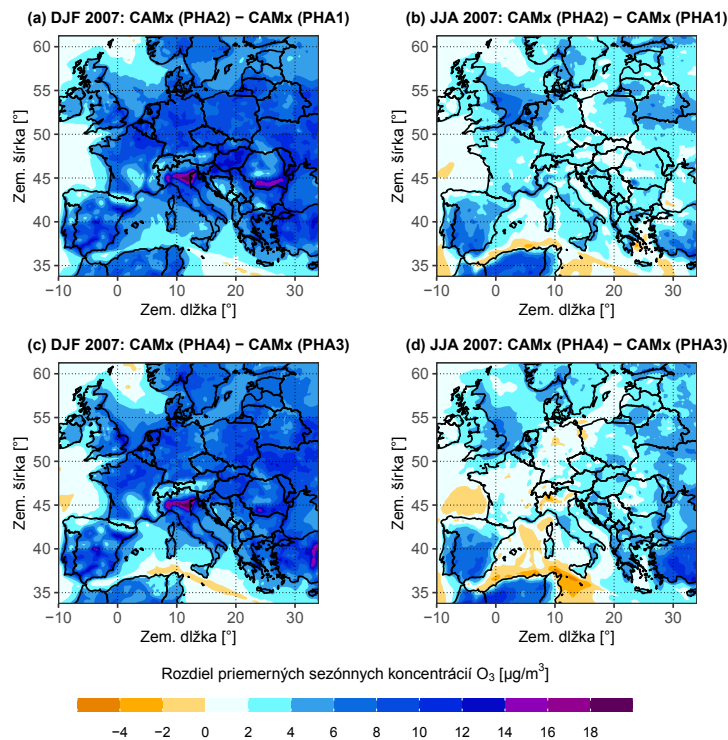
Obrázok 6.1: Polia priemernej sezónnej koncentrácie ozónu v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 v najnižšej modelovej vrstve určené zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). V poliach sú krúžkami zobrazené príslušné sezónne koncentrácie O₃ na vybraných EMEP staniách (vynesené v rovnakej farebnej škále ako sú modelové hodnoty), ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.13.



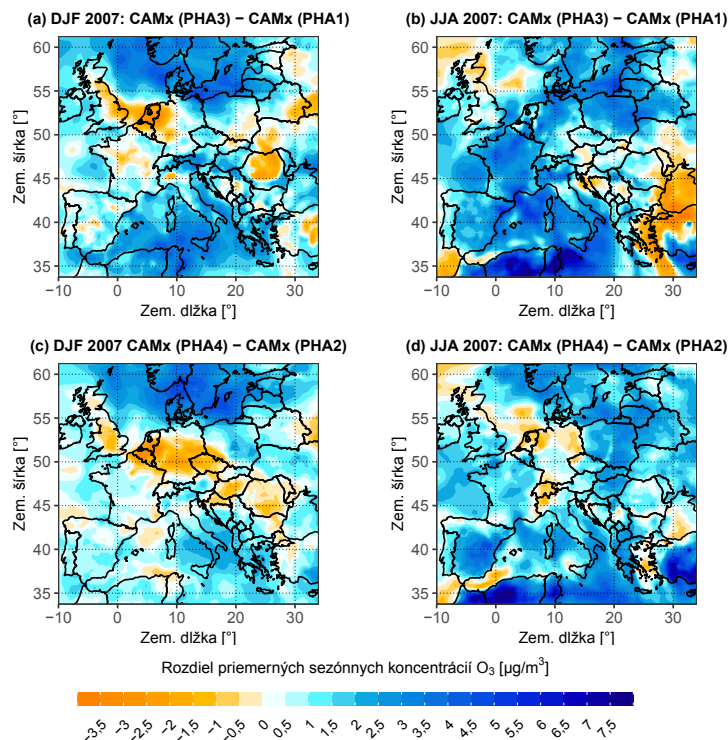
Obrázok 6.2: Vertikálne profily priemernej sezónnej koncentrácie O_3 (vľavo hore), NO_2 (vpravo hore), SO_2 (vľavo dole) a $PM_{2.5}$ (vpravo dole) v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 nad regiónmi západnej, východnej a južnej Európy určené zo simulácie CAMx(PHA1). Koncentrácie plynov sú v jednotkách ppbv, koncentrácie $PM_{2.5}$ sú v $\mu g.m^{-3}$. Geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.



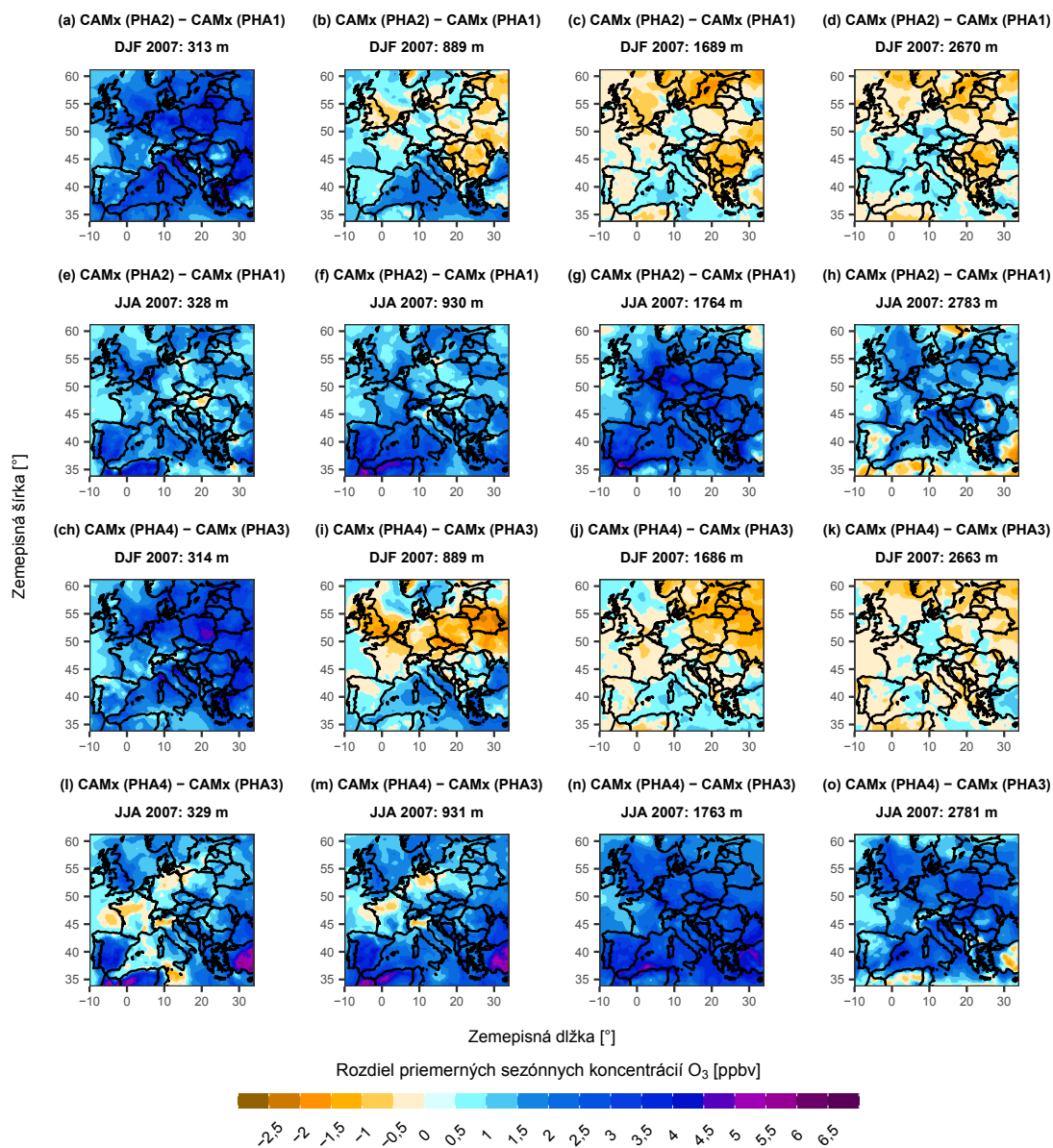
Obrázok 6.3: Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií O₃ v ppbv nad regiónom južnej (modré čiary), západnej (zelené čiary) a východnej (červené čiary) Európy v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3), CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2). Geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.



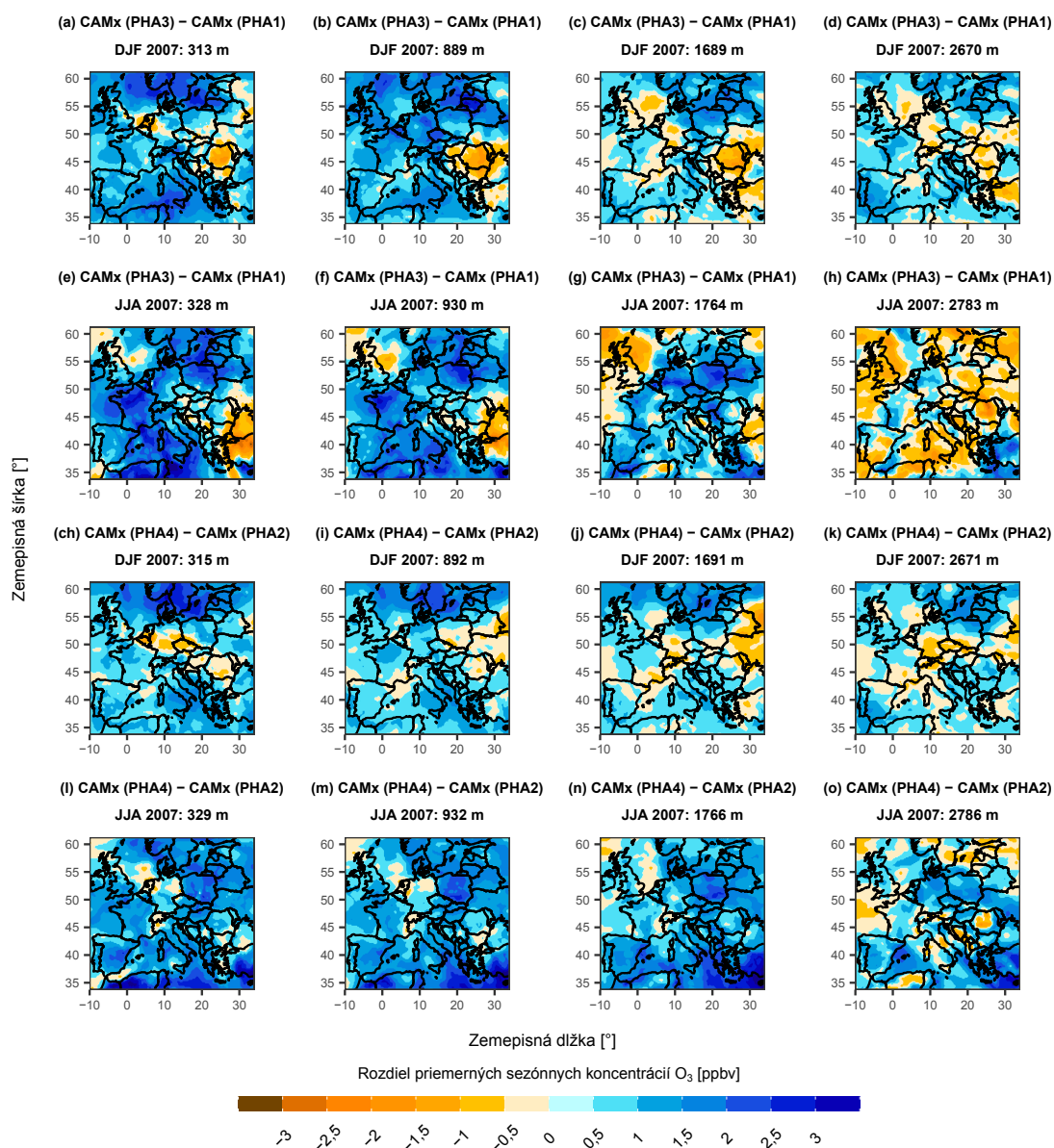
Obrázok 6.4: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií O₃ v µg.m⁻³ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 v najnižšej modelovej vrstve určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



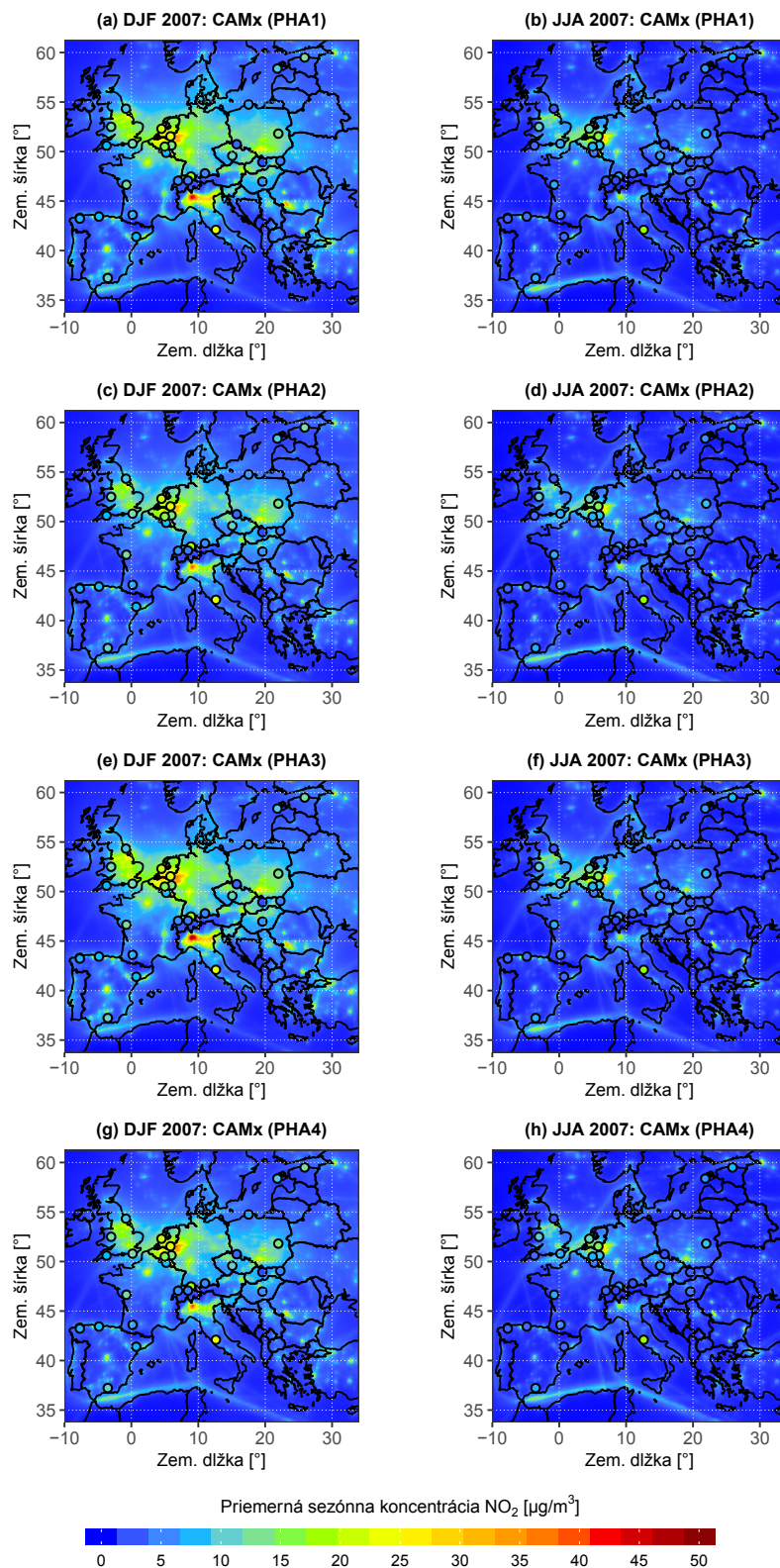
Obrázok 6.5: To isté ako na obr. 6.4, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).



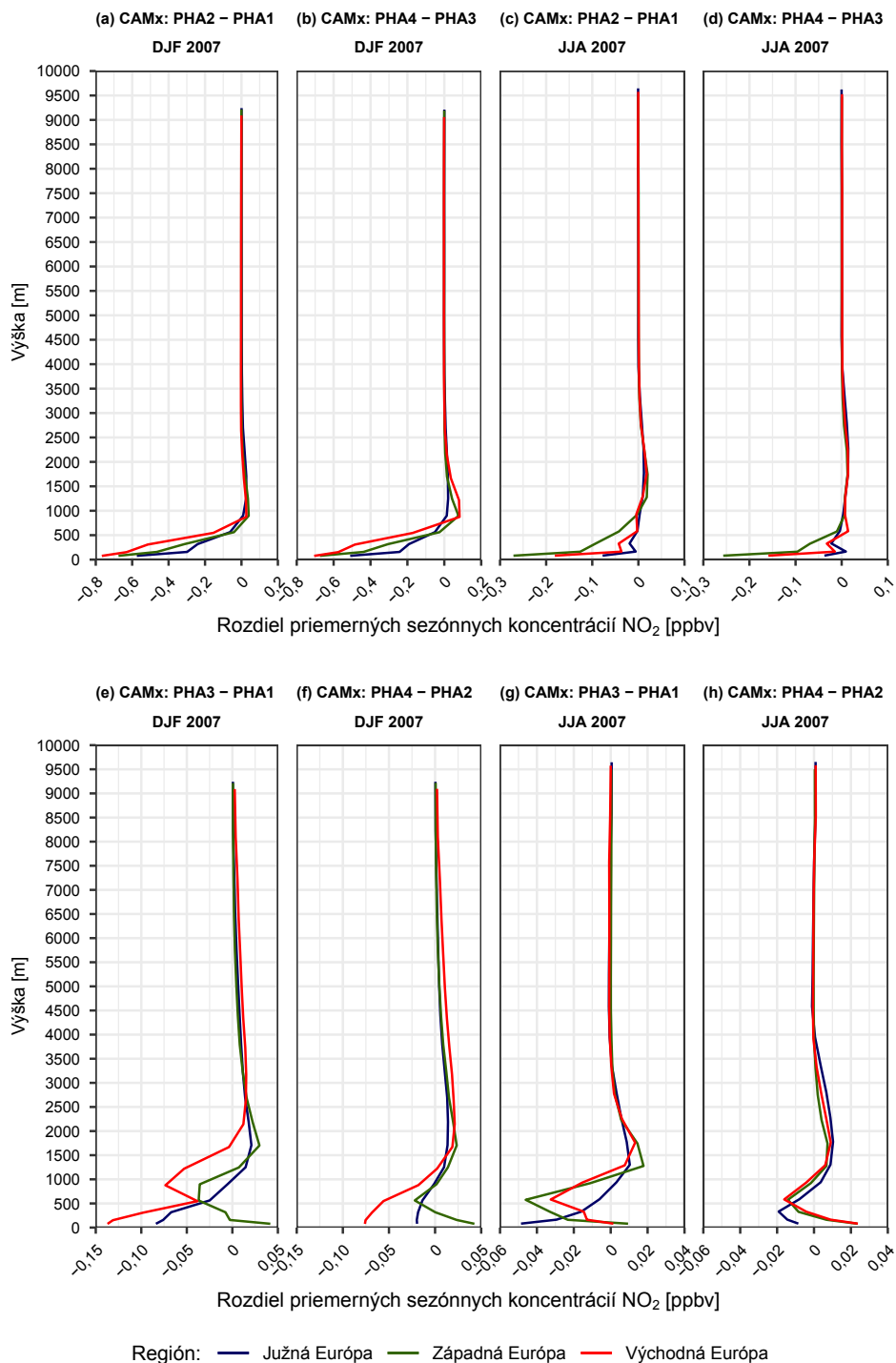
Obrázok 6.6: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií O₃ v ppbv v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve (ich priemerné výšky v metroch sú uvedené v obrázkoch) určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



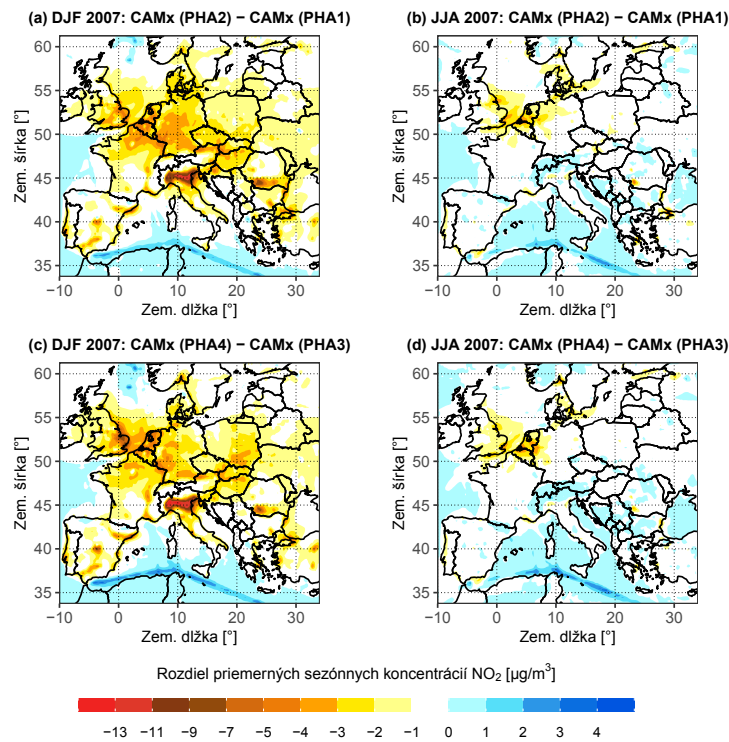
Obrázok 6.7: To isté ako na obr. 6.6, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).



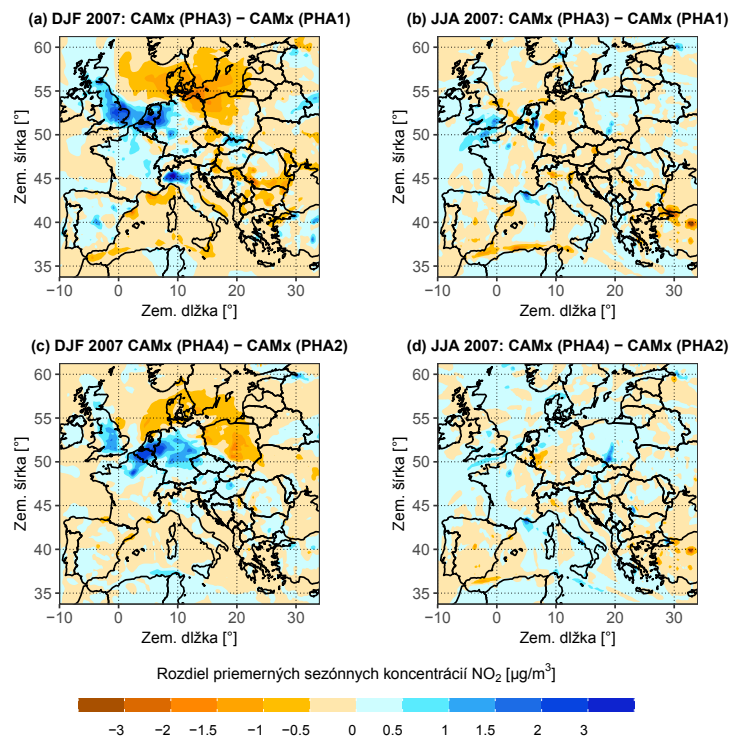
Obrázok 6.8: Polia priemernej sezónnej koncentrácie oxidu dusičitého v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 v najnižšej modelovej vrstve určené zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). V poliach sú krúžkami zobrazené príslušné koncentrácie NO₂ na vybraných EMEP staniách (vynesené v rovnakej farebnej škále ako sú modelové hodnoty), ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.14.



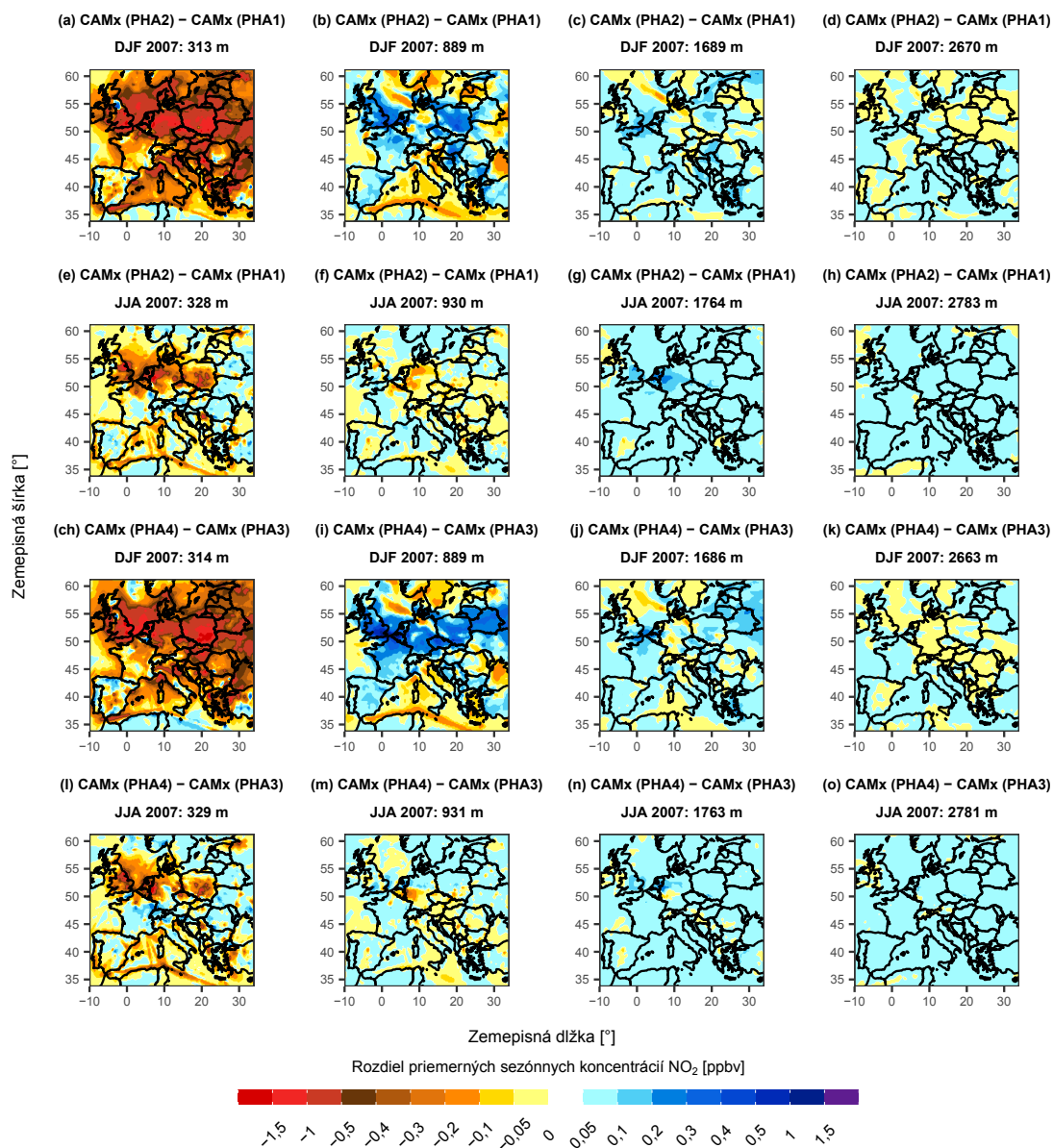
Obrázok 6.9: Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií NO₂ v ppbv nad regiónom južnej (modré čiary), západnej (zelené čiary) a východnej (červené čiary) Európy v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3), CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2). Geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.



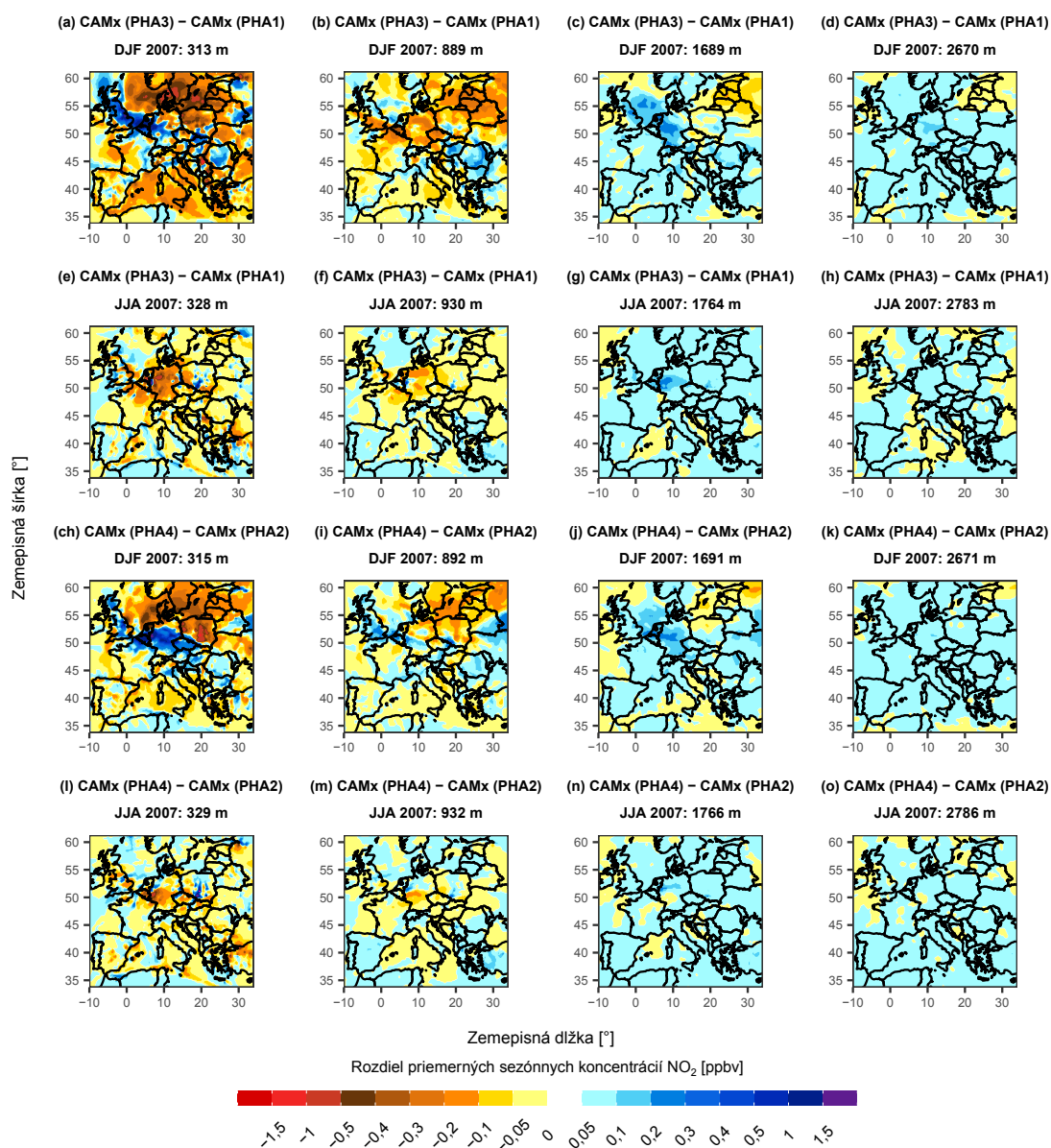
Obrázok 6.10: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií NO₂ v µg.m⁻³ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 určené v najnižšej modelovej vrstve medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



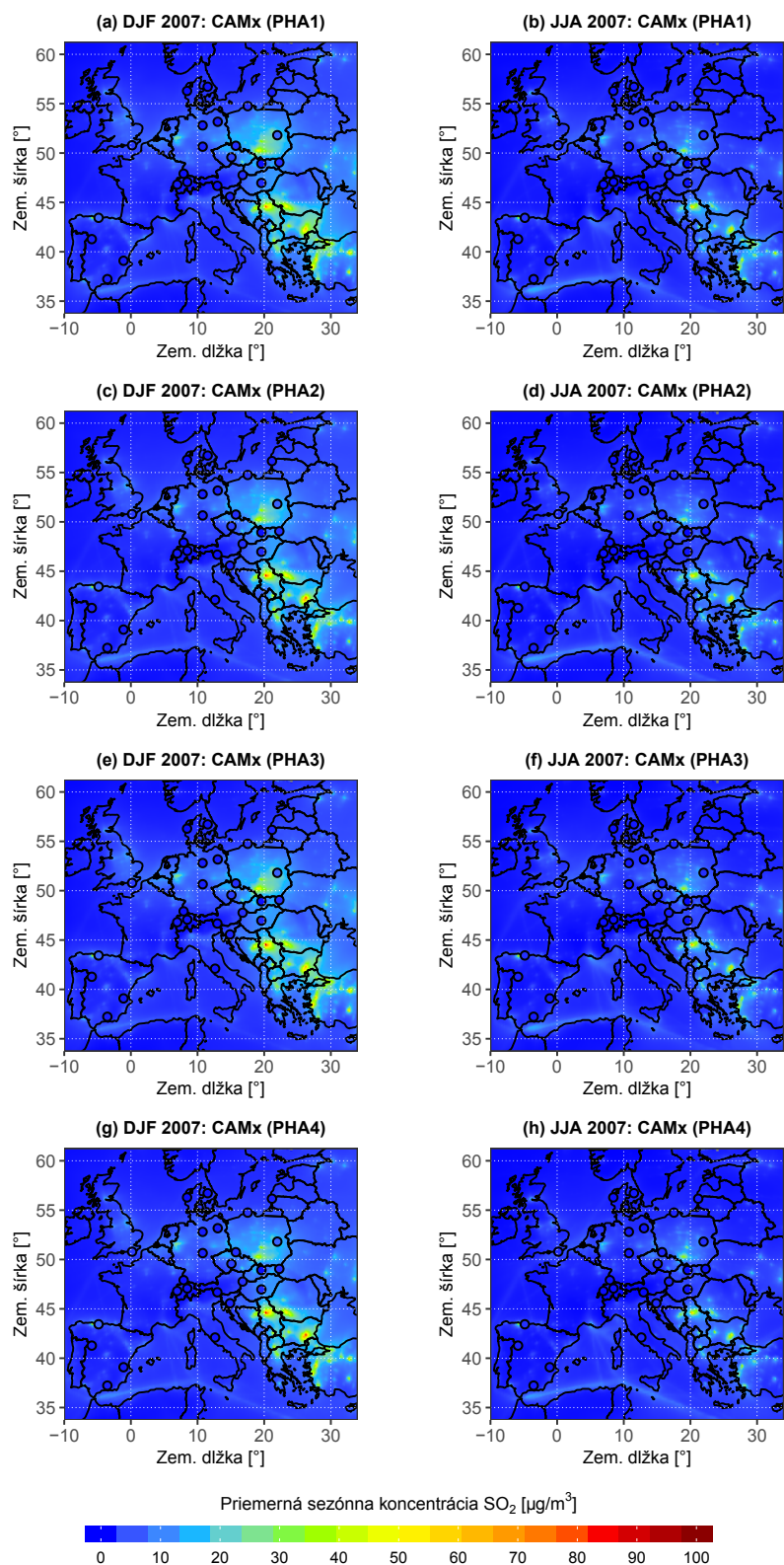
Obrázok 6.11: To isté ako na obr. 6.10, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).



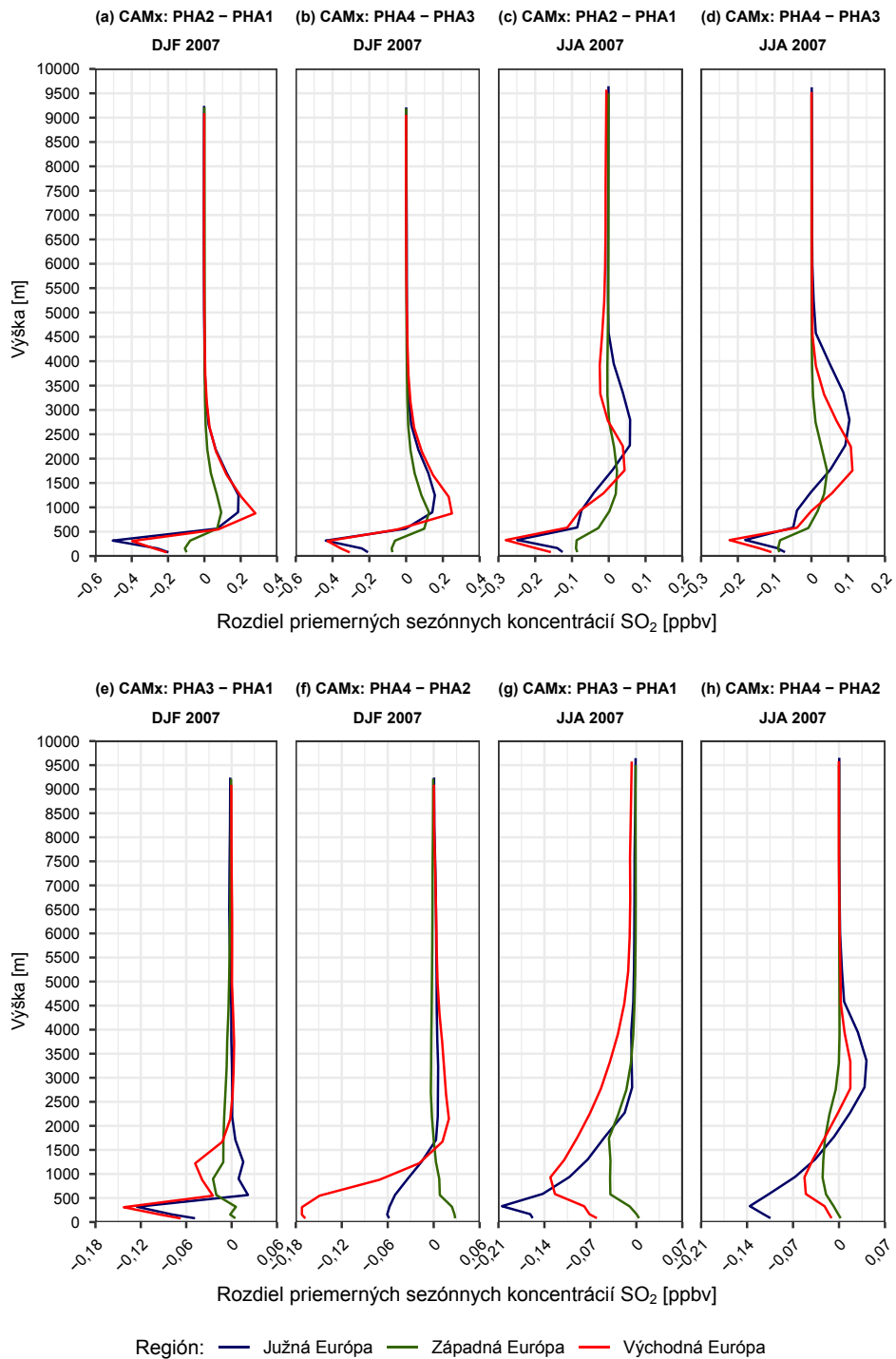
Obrázok 6.12: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií NO₂ v ppbv v zime (DJF)/leto (JJA) 2007 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve (ich priemerné výšky v metroch sú uvedené v obrázkoch) určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



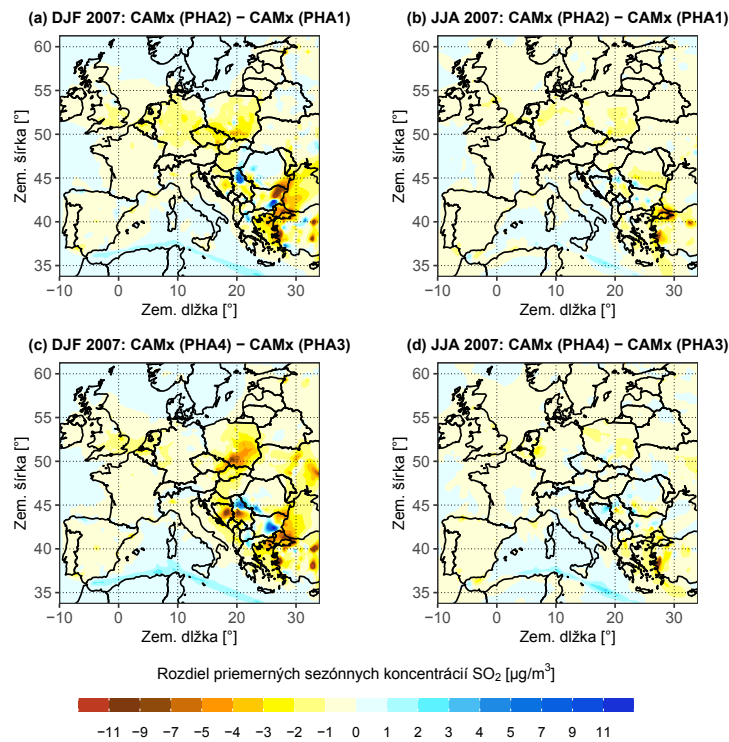
Obrázok 6.13: To isté ako na obr. 6.12, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).



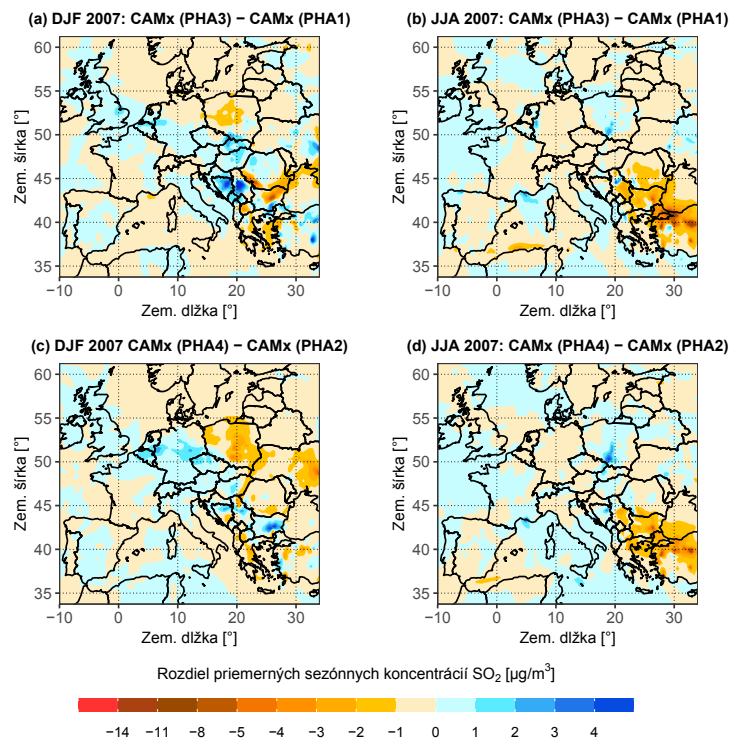
Obrázok 6.14: Polia priemernej sezónnej koncentrácie oxidu siričitého v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 v najnižšej modelovej vrstve určené zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). V poliach sú krúžkami zobrazené príslušné koncentrácie SO₂ na vybraných EMEP staniách (vynesené v rovnakej farebnej škále ako sú modelové hodnoty), ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.15 a 6.16.



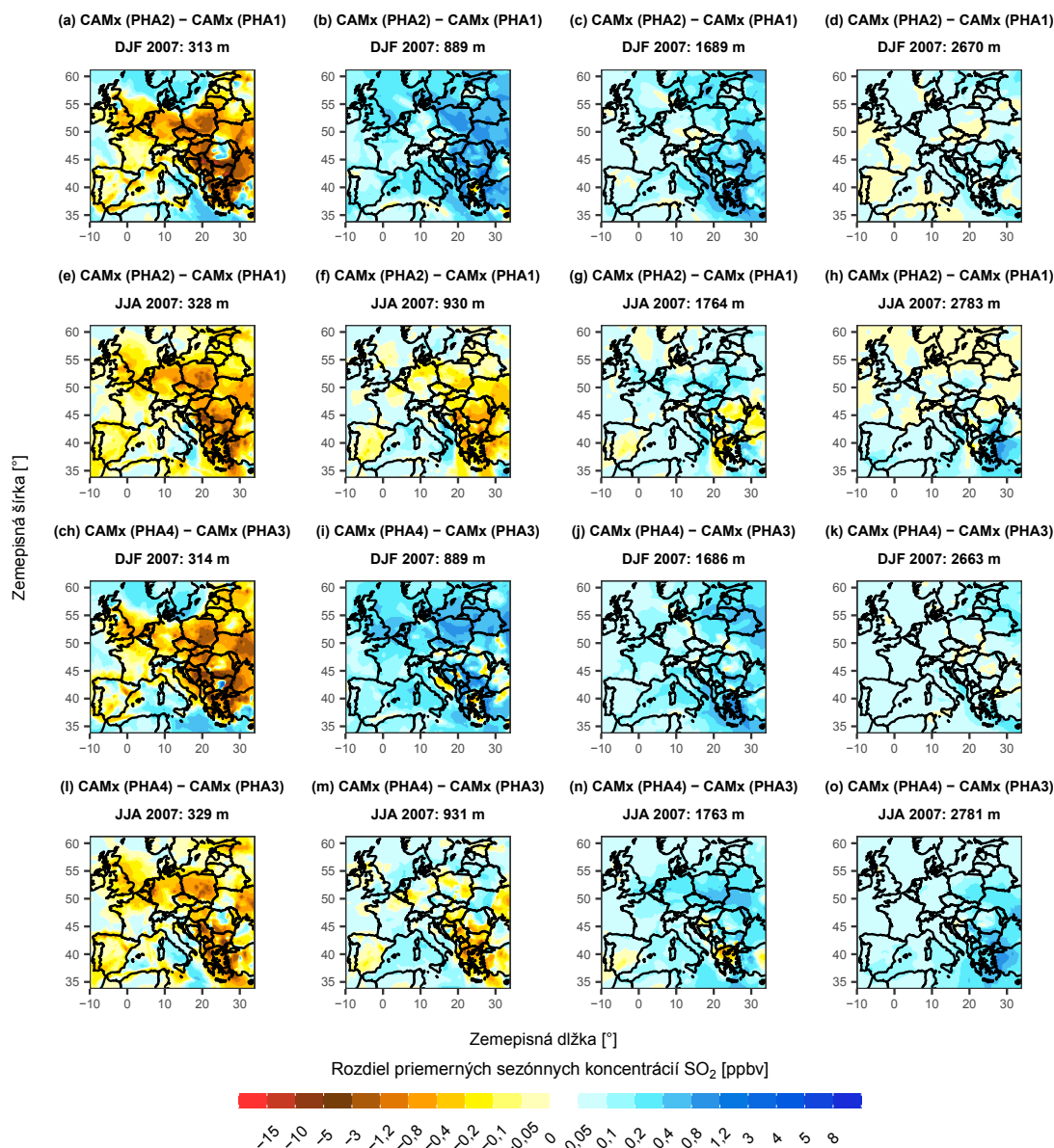
Obrázok 6.15: Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií SO₂ v ppbv nad regiónom južnej (modré čiary), západnej (zelené čiary) a východnej (červené čiary) Európy v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3), CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2). Geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.



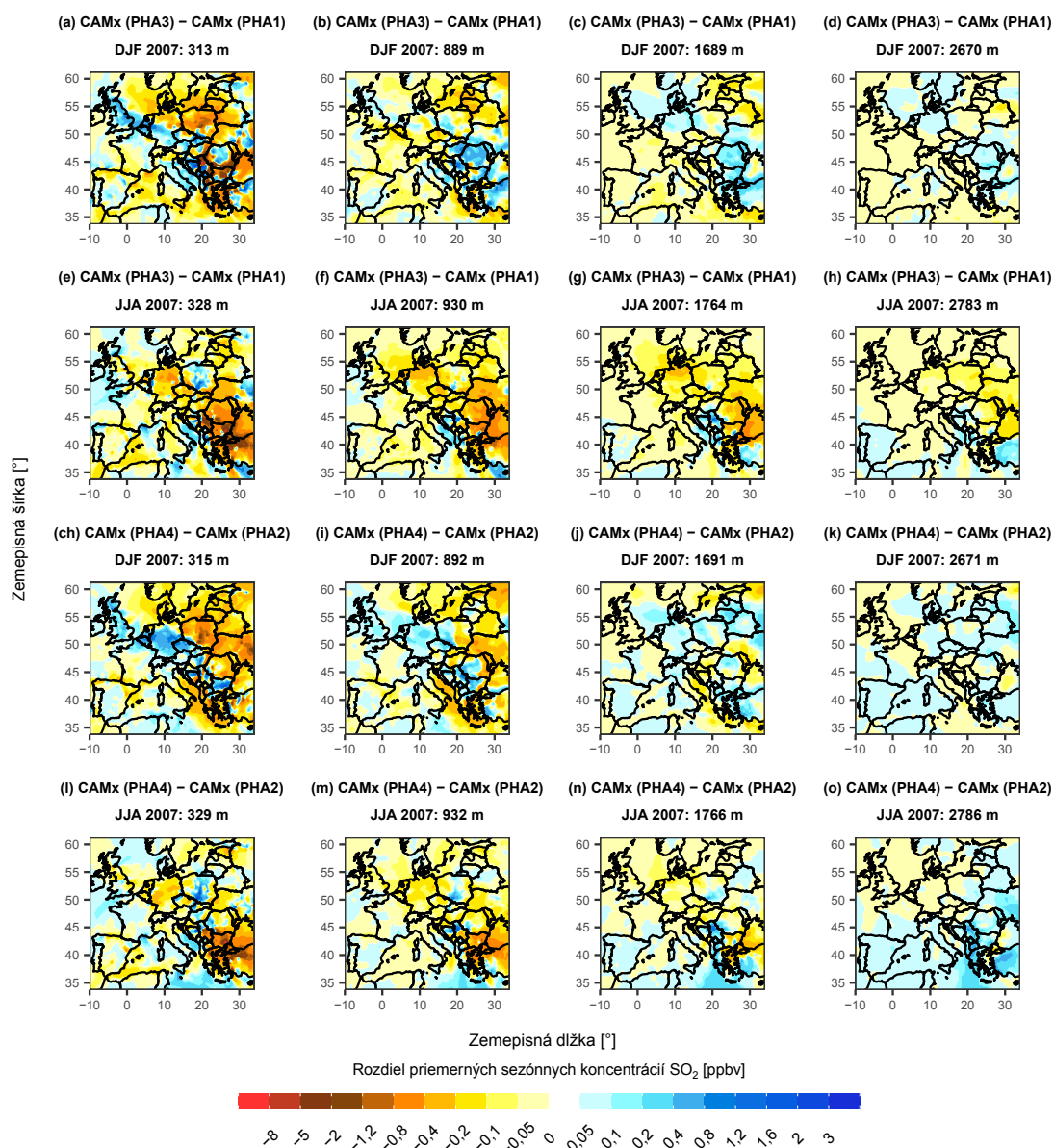
Obrázok 6.16: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií SO₂ v μg.m⁻³ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 určené v najnižšej modelovej vrstve medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



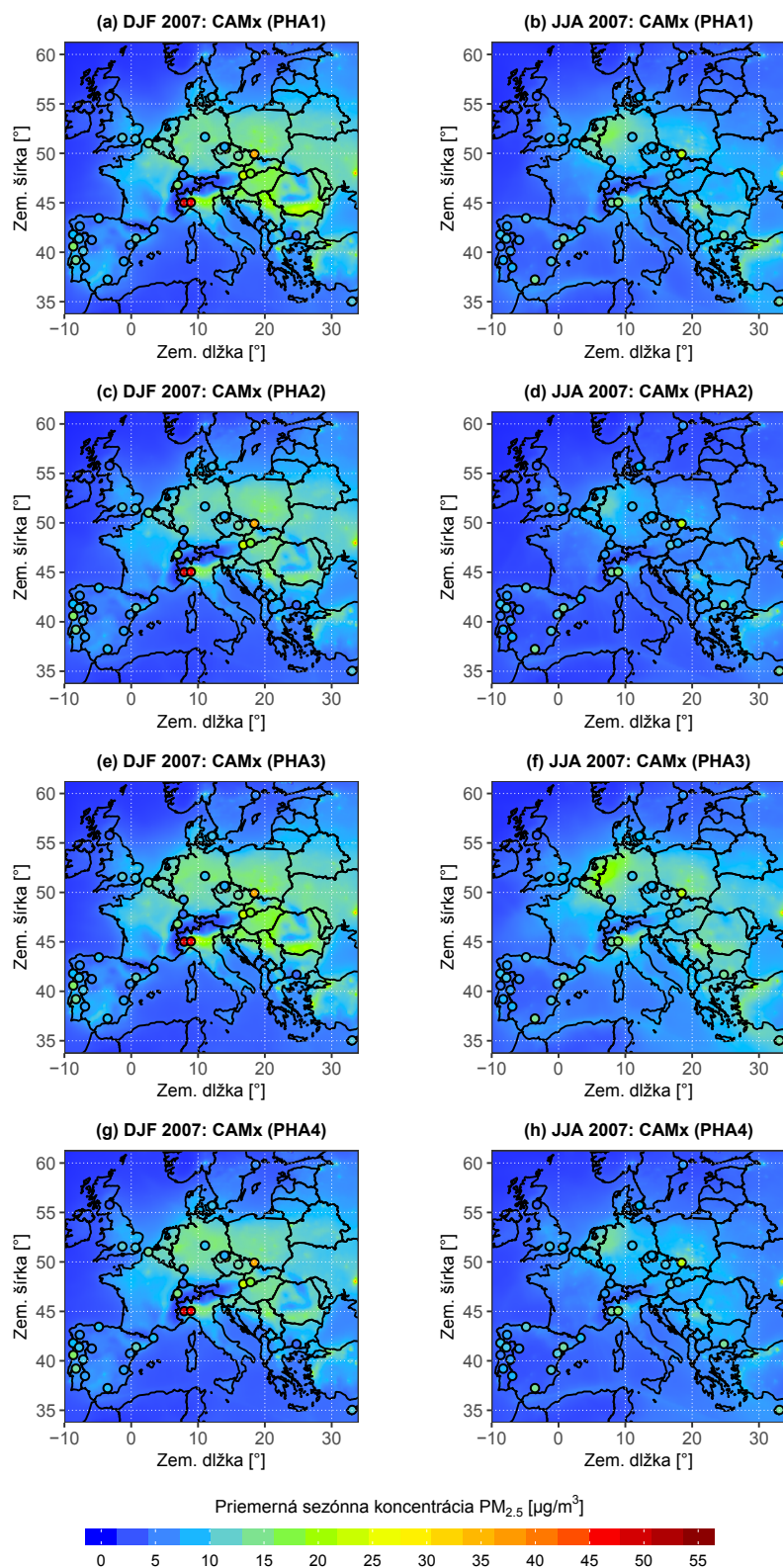
Obrázok 6.17: To isté ako na obr. 6.16, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).



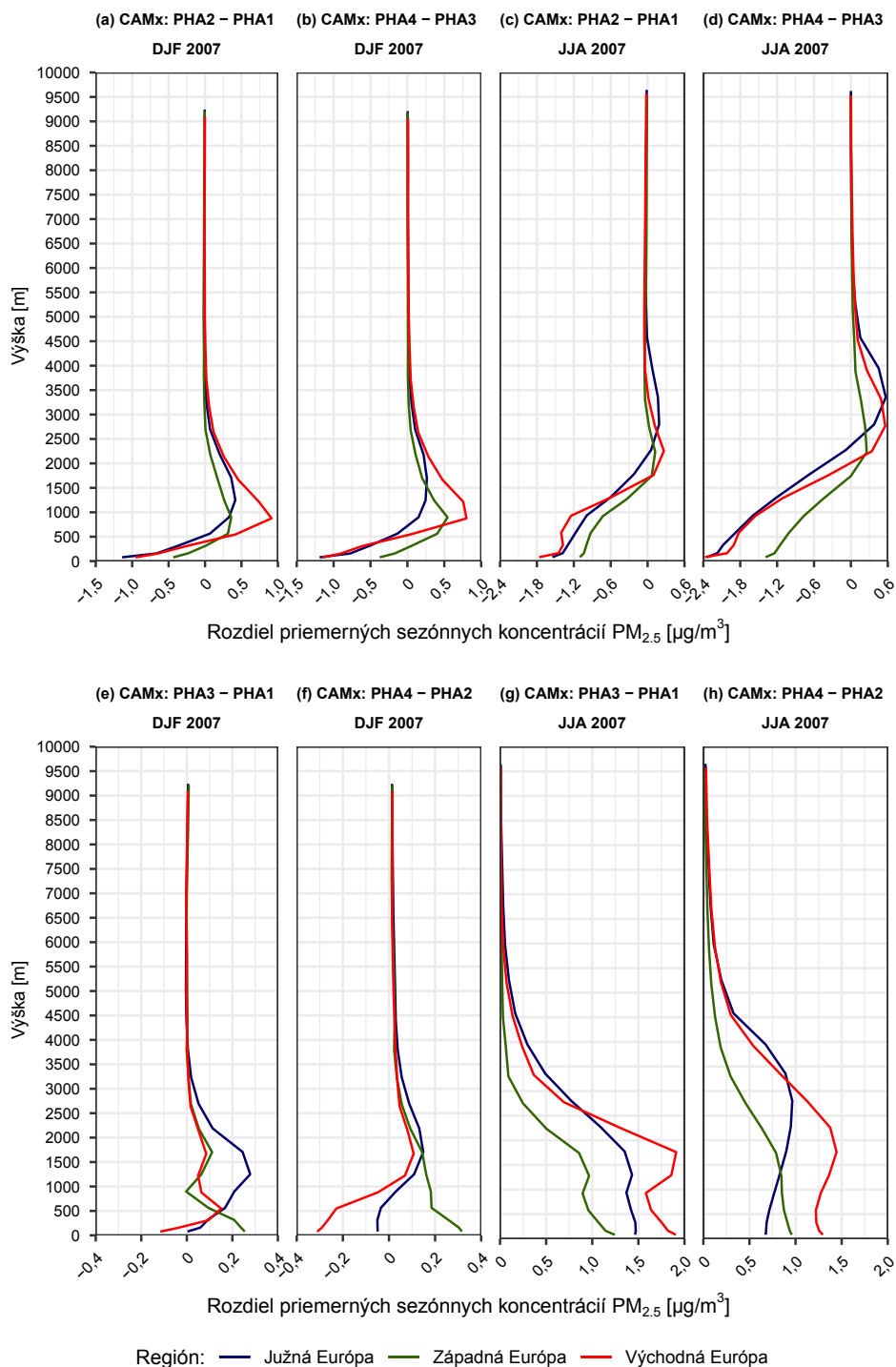
Obrázok 6.18: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií SO₂ v ppbv v zime (DJF)/leťe (JJA) 2007 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve (ich priemerné výšky v metroch sú uvedené v obrázkoch) určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



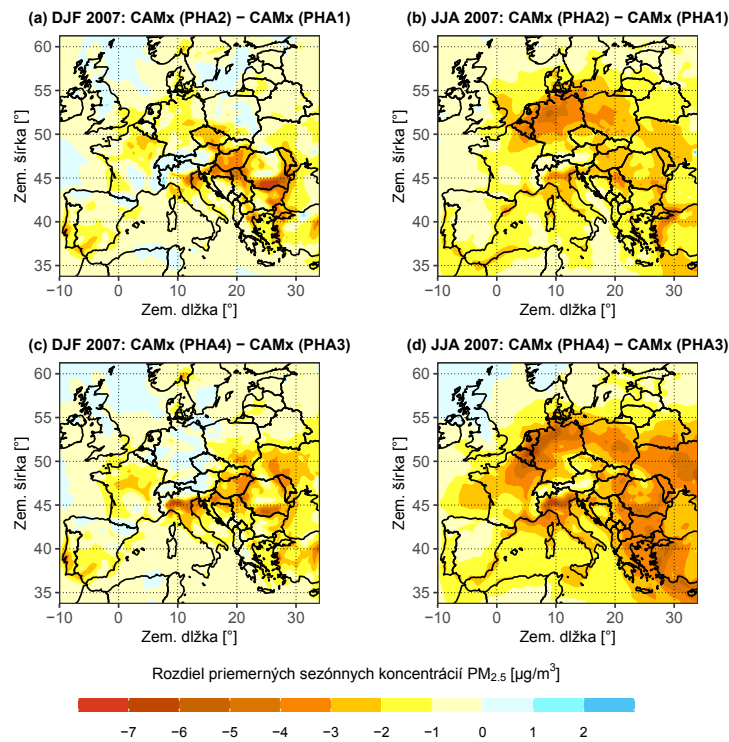
Obrázok 6.19: To isté ako na obr. 6.18, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).



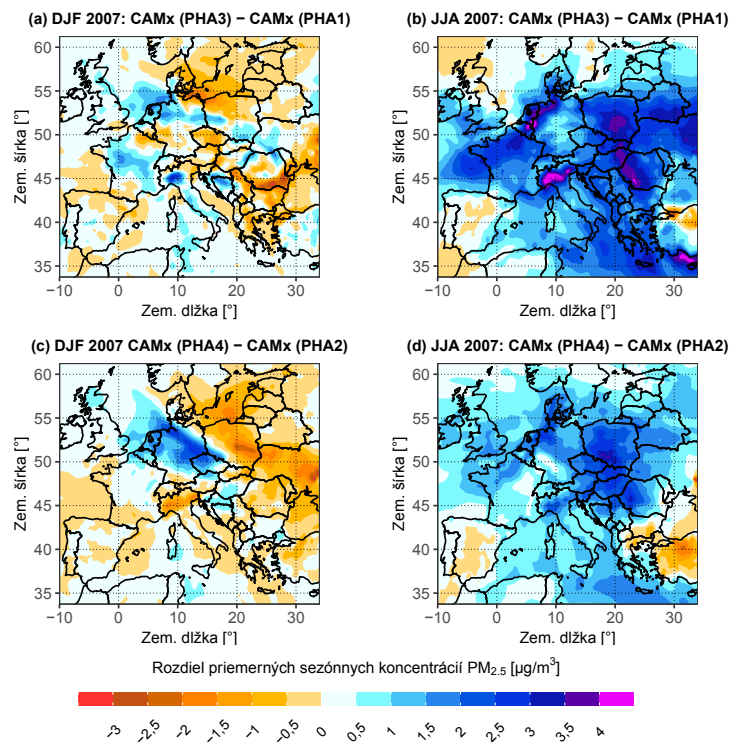
Obrázok 6.20: Polia priemernej sezónnej koncentrácie PM_{2,5} v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 v najnižšej modelovej vrstve určené zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). V poliach sú krúžkami zobrazované príslušné koncentrácie PM_{2,5} na vybraných EMEP stanicích (vynesené v rovnakej farebnej škále ako sú modelové hodnoty), ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.17 a 6.18.



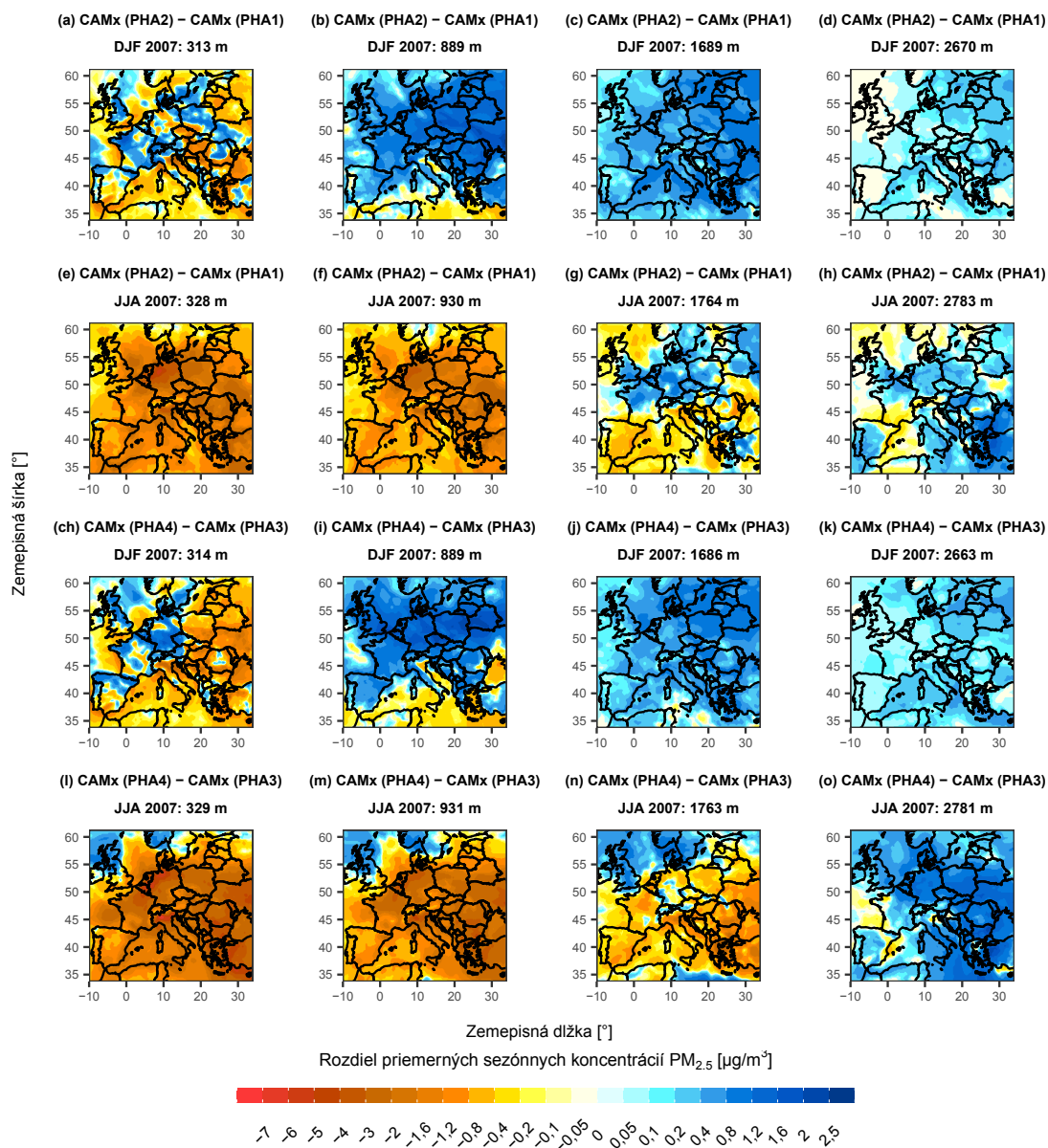
Obrázok 6.21: Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií $PM_{2.5}$ v $\mu g \cdot m^{-3}$ nad regiónom južnej (modré čiary), západnej (zelené čiary) a východnej (červené čiary) Európy v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3), CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2). Geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.



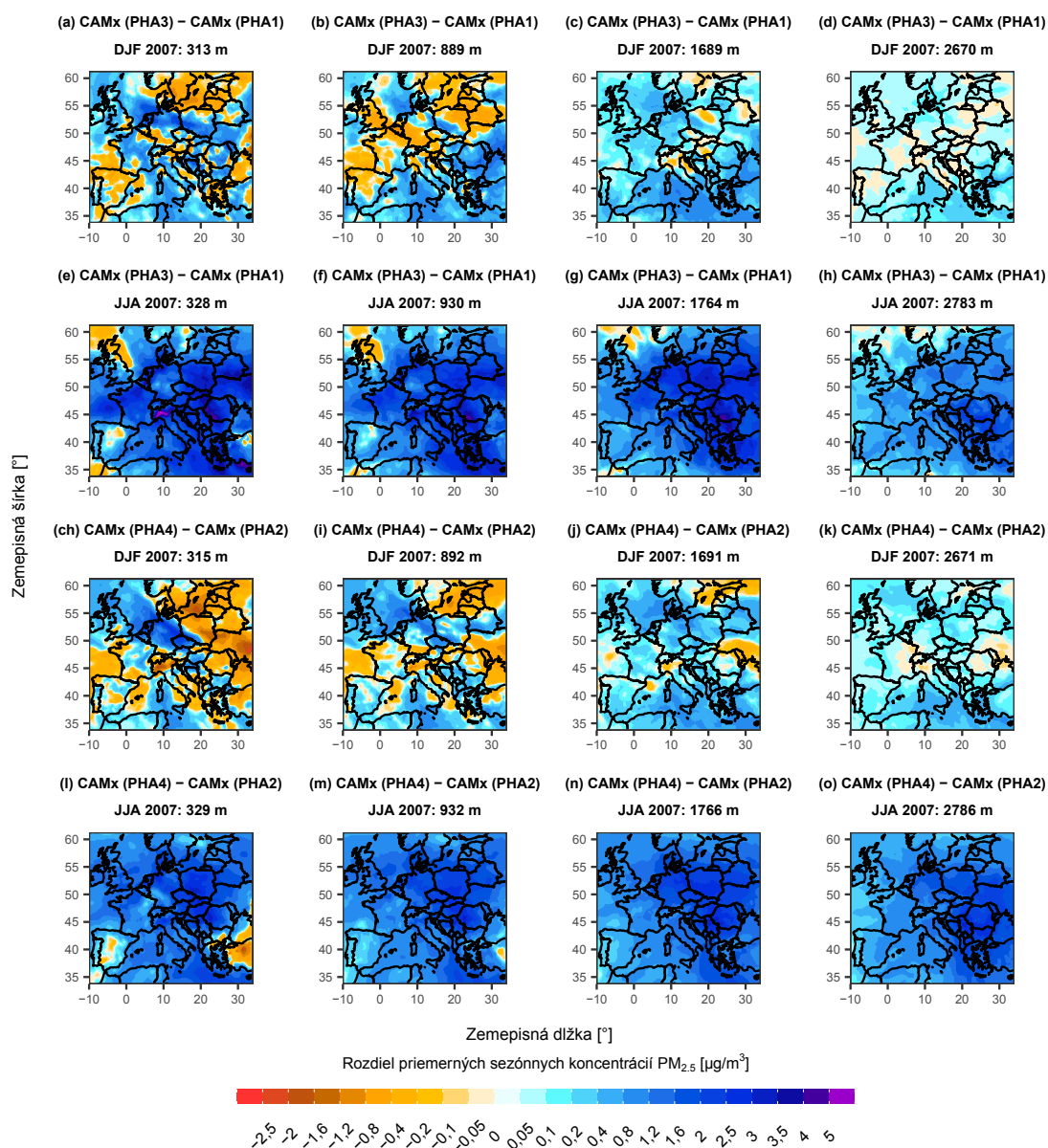
Obrázok 6.22: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií PM_{2.5} v μg.m⁻³ v zime (DJF)/lete (JJA) 2007 určené v najnižšej modelovej vrstve medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



Obrázok 6.23: To isté ako na obr. 6.22, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).



Obrázok 6.24: Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií PM_{2,5} v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zime (DJF)/leťe (JJA) 2007 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve (ich priemerné výšky v metroch sú uvedené v obrázkoch) určené medzi simuláciami: CAMx (PHA2) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA3).



Obrázok 6.25: To isté ako na obr. 6.24, ale medzi simuláciami: CAMx (PHA3) a CAMx (PHA1), CAMx (PHA4) a CAMx (PHA2).

6.3 Validácia simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)

Validácia je zameraná najmä na porovnanie výsledkov zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) so staničnými meraniami, pričom k hodnoteniu koncentrácií:

- plyných polutantov boli použité časové rady ich hodinových alebo denných priemerov (v závislosti od ich dostupnosti) z vidieckych monitorovacích staníc začlenených do projektu EMEP;
- jemnej frakcie aerosólových častíc boli použité časové rady ich hodinových alebo denných priemerov z vidieckych monitorovacích staníc začlenených do 8. verzie databázy AirBase (<https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/data/aqereporting-8>).

V prípade oxidu dusičitého sú taktiež porovnané polia jeho priemerných sezónnych stĺpcových koncentrácií zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) s tými, ktoré boli určené zo satelitných dát. K týmto porovnaniam boli použité vytvorené produkty: polia priemerných mesačných stĺpcových koncentrácií troposférického oxidu dusičitého určené z meraní spektrometra GOME-2 (*Global Ozone Monitoring Experiment-2*), ktorý je umiestnený na družici Metop-A[†] (Boersma a kol., 2004).

6.3.1 Metodika validácie

Metodika validácie modelov so staničnými dátami

Ako prvé sú hodnotené sezónne priemery koncentrácie jednotlivých polutantov na staniaciach uvedených v tab. 6.13 – 6.18, ktoré boli určené ako aritmetické priemery všetkých hodnôt priemerných koncentrácií (hodinových či denných) spadajúcich časovo do danej sezóny. Im prislúchajúce hodnoty modelové boli určené z polí priemernej sezónnej koncentrácie v 1. modelovej vrstve, a to priradením hodnôt z bodov siete, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k staniciam. Hodnoty staničných a modelových sezónnych priemerov zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) vo všetkých 4 sezónach sú porovnané pomocou rozptylových diagramov, v ktorých sú body farebne, resp. tvarovo rozlíšené, a to s cieľom zachytiť závislosť rozptylu od regiónu Európy, do ktorého stanice spadajú, a taktiež od nadmorskej výšky, v ktorej sa stanice nachádzajú. Stanice boli podľa ich nadmorskej výšky rozdelené do dvoch skupín: do prvej, resp. do druhej spadajú tie z nich, ktoré sa nachádzajú v nadmorskej výške do, resp. nad 550 metrov nad morom. Toto rozdelenie má svoje opodstatnenie, ktoré vychádza zo schopnosti modelu korektné zachytiť nadmorské výšky vyššie položených oblastí* v dôsledku

[†]Dáta sú dostupné na internetovej stránke: <http://www.temis.nl/airpollution/no2.html>.

*Na túto skutočnosť je poukázané v tab. 6.13 – 6.18, v ktorých je pri každej stanici okrem jej reálnej nadmorskej výšky uvedená aj jej modelová nadmorská výška. Z nich je totiž jasne vidieť, že vo vyšších polohách sú modelové výšky podhodnotené voči ich reálnym hodnotám, a to spravidla o to výraznejšie, čím sa stanice nachádzajú vyššie nad morom. Ako príklad je možné uviesť stanicu na Chopku v Nízkych Tatrách, ktorá sa nachádza v nadmorskej výške 2008 m n. m., pričom v modeli má gridový bod, ktorý je k nej najbližšie, nadmorskú výšku len 873 m n. m.

použitého horizontálneho rozlíšenia. Pretože všetky modelové priemery (nielen sezónne) sú vo validácii počítané z 1. vrstvy, ktorej výška, ako už bolo zmienené, je v ročnom priemere zhruba 80 m nad zemským povrchom, bola z porovnania skutočných a modelových nadmorských výšok staníc zvolená hranica 550 m n. m. za tú, nad ktorou dochádza k výraznejším rozdielom než práve 80 m. Vzhľadom k vyššie uvedenej inkonzistencii modelových a reálnych nadmorských výšok som sa pri validácii podrobnejšie zameral najmä na nižšie položené stanice.

Ďalej sú v jednotlivých sezónach roka hodnotené priemerné denné chody priemernej hodinovej koncentrácie, ktoré reprezentujú aritmetické priemery denných chodov priemernej hodinovej koncentrácie z vybraných staníc[†] (bodov siete 1. modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k staniciam). Následne sú v rámci celej Európy i v jej troch uvažovaných regiónoch hodnotené priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie, ktoré reprezentujú aritmetické priemery ročných chodov priemernej mesačnej koncentrácie z vybraných staníc (bodov siete 1. modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k staniciam).

Ďalšími posudzovanými kritériami medzi staničnými a modelovými koncentraciami sú prekročenia imisných limitov[‡]:

- Pri hodnotení ozónu bol pre každú stanicu vypočítaný počet dní v roku, kedy jeho maximálny denný osemhodinový klzavý priemer koncentrácie prekročil hodnotu $120 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. Z modelových koncentrácií v 1. vrstve boli analogickým spôsobom vypočítané polia počtu dní s prekročeným imisným limitom, z ktorých boli následne k staniciam priradené (rovnakým spôsobom ako pri priemerných sezónnych koncentráciách) hodnoty modelové.
- Pri hodnotení oxidu dusičitého bol pre každú stanicu, z ktorej boli dostupné hodinové priemery koncentrácie, vypočítaný počet hodín v roku, kedy jeho priemerná hodinová koncentrácia prekročila hodnotu $200 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. Hodnoty modelové boli určené rovnakým spôsobom z časových radov v bodoch siete v 1. modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k staniciam.
- Pri hodnotení oxidu siričitého bol pre každú stanicu vypočítaný počet dní v roku, kedy jeho priemerná denná koncentrácia prekročila hodnotu $125 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. Hodnoty modelové boli určené identickým spôsobom z časových radov v bodoch siete v 1. modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k staniciam.
- Pri hodnotení $\text{PM}_{2,5}$ bol pre každú stanicu vypočítaný ročný priemer ich koncentrácie, pre ktorý je stanovený imisný limit $20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. Z modelových koncentrácií v 1. vrstve boli vypočítané polia priemernej ročnej koncentrácie, z ktorých boli následne k staniciam priradené hodnoty modelové.

Na záver boli priemerné časové rady denných koncentrácií polutantov na vybraných stanicích porovnané s ich ekvivaletmi zo všetkých simulácií CAMx

[†]Vybranými stanicami sú mienené stanice, ktoré ležia v nadmorskej výške do 550 m n. m.

[‡]Hodnoty imisných limitov, ako aj metodiky ich stanovovania sa riadia zákonom: v práci boli počítané podľa nariadení zákona o ochrane ovzdušia 201/2012 Sb., ktorý platí v Českej republike (http://portal.chmi.cz/files/portal/docs/uoco/isko/info/limity_CZ.html).

(PHA1) – CAMx (PHA4) v rámci celého roka 2007 i v jeho sezónach pomocou 5 štatistických ukazovateľov, konkrétne pomocou: Pearsonovho korelačného koeficientu (r), frakčnej systematickej chyby (FB), odmocniny strednej kvadratickej chyby ($RMSE$), normovanej strednej kvadratickej chyby ($NMSE$) a normovanej štandardnej odchýlky (NSD), keďže tie, ako uvádzajú Huszár a kol. (Huszár a kol., 2012), boli štatisticky identifikované za najdôležitejšie pri hodnotení presnosti modelov kvality ovzdušia. Všetky ukazovatele boli pritom počítané podľa vzťahov uvedených v práci Borrego a kol. (Borrego a kol., 2008):

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N [c_i^S - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^S)] [c_i^M - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^M)]}{\sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N [c_i^S - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^S)]^2} \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N [c_i^M - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^M)]^2}},$$

$$FB = 2 \frac{(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^S) - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^M)}{[(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^S) + (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^M)]},$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (c_i^S - c_i^M)^2},$$

$$NMSE = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (c_i^S - c_i^M)^2}{(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^S) (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^M)},$$

$$NSD = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [c_i^M - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^M)]^2}}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [c_i^S - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^S)]^2}},$$

kde: c_i^S , resp. c_i^M reprezentuje i -ty člen z časového radu priemerných denných staničných, resp. modelových koncentrácií a N je celkový počet týchto koncentrácií v časových radoch.

Stručný popis štatistických ukazovateľov

Význam r aj $RMSE$ je popísaný v podkapitole 5.2.1. FB , ako je vidieť z jej definície, vyjadruje dvojnásobok podielu rozdielu priemernej pozorovanej a modelovej koncentrácie a súčtu týchto priemerov, a preto v ideálnom prípade zhody pozorovania s modelom nadobúda hodnotu 0 (celkovo môže nadobúdať hodnotu od -2 po 2). $NMSE$ predstavuje podiel strednej kvadratickej chyby súboru pozorovaných a modelových koncentrácií a súčinu priemerných hodnôt týchto súborov, z čoho vyplýva, že v ideálnom prípade zhody pozorovania s modelom nadobúda hodnotu 0 (celkovo môže nadobúdať ľubovoľnú kladnú hodnotu). Hodnoty $NMSE$ vyššie ako 1 poukazujú na skutočnosť, že distribúcia koncentrácií nemá normálne rozdelenie, ale logaritmicke-normálne rozdelenie (Chang a Hanna, 2004). NSD je definovaná ako podiel štandardných odchýlok modelových a pozorovaných koncentrácií, a teda v ideálnom prípade zhody pozorovania s modelom nadobúda hodnotu 1 (celkovo môže nadobúdať ľubovoľnú kladnú hodnotu).

Metodika validácie modelov s družicovými dátami

K porovnaniu modelových a družicových dát troposférického oxidu dusičitého boli použité polia priemerných mesačných stĺpcových koncentrácií, ktoré sú vyjadrené v molekulách na centimeter štvorcový. Pretože priemerné modelové koncentrácie NO₂ vo vrstvách sú vyjadrené v ppmv, bolo nutné z nich odvodiť koncentrácie stĺpcové. Po ich odvodení, ktoré je popísané nižšie, boli vypočítané polia ich sezónnych priemerov ako aritmetické priemery všetkých hodinových hodnôt z dní spadajúcich do príslušných sezón a tie boli následne bilineárne interpolované do geografických súradníc použitých v poliach družicových.

Pri odvodení prevodu priemerných koncentrácií NO₂ v jednotlivých vrstvách modelu na stĺpcové koncentrácie vyjadrené v molekulách na centimeter štvorcový bola použitá nasledujúca úvaha:

- Objem NO₂ v každej sieťovej bunke je daný súčinom jej objemu a priemernej koncentrácie NO₂ v ppmv. Vychádzajúc zo znalosti rozmerov sieťových buniek (veľkosť podstavy buniek je známa z horizontálneho rozlíšenia modelu; hrúbky buniek je možné dopočítať z výšok vrstiev, ktoré sú jedným z modelových výstupov) je možné vypočítať ich objemy, a teda stanoviť aj objem NO₂ v nich.
- Zo znalosti priemerného tlaku, priemernej teploty* a objemu NO₂ v každej sieťovej bunke je v nich možné pomocou stavovej rovnice ideálneho plynu stanoviť látkové množstvo NO₂.
- Na základe znalosti látkového množstva je možné vypočítať (prenásobením Avogadrovou konštantou) celkový počet molekúl NO₂ v objeme sieťovej bunky. Podiel tohto počtu a veľkosti plochy podstavy sieťovej bunky v cm² vyjadruje stĺpcovú koncentráciu NO₂ v sieťovej bunke v požadovaných jednotkách.

Na základe tejto úvahy bol odvodený nasledujúci vzťah pre prevod poľa koncentrácie NO₂ v *i*-tej modelovej vrstve na pole jeho stĺpcovej koncentrácie (N_i^*) v jednotkách 10¹⁵ molekúl.cm⁻²:

$$N_i^* = \frac{6,022}{8,314} c_{NO_2}^i h_i \frac{[50 + \sigma_i (p_s - 50)]}{\bar{T}_i},$$

kde: $c_{NO_2}^i$ je pole koncentrácie NO₂ v *i*-tej vrstve (vyjadrenej v ppmv), h_i je pole hrúbky *i*-tej vrstvy (vyjadrenej v metroch), σ_i je zovšeobecnená vertikálna súradnica v strede *i*-tej vrstvy, p_s je pole prízemného tlaku vzduchu (vyjadreného v hPa) a \bar{T}_i je pole priemernej termodynamickkej teploty v *i*-tej vrstve (vyjadrenej v Kelvinoch). Polia celkových modelových stĺpcových koncentrácií NO₂ boli vytvorené sčítaním jednotlivých príspevkov zo všetkých 18 modelových vrstiev.

Všetky výpočty uvedené v metodike boli realizované pomocou skriptov vytvorených v Bashi, v ktorých boli použité funkcie zo softvéru CDO, ako aj pomocou programov vytvorených v aplikácii RStudio.

*Priemerný tlak a teplotu vzduchu vo vrstve je možné dopočítať z výstupov modelu RegCM. Priemerný tlak vo vrstvách bol počítaný zo znalosti prízemného tlaku, ktorý je poskytovaný na výstupe modelu RegCM, tlaku na hornej hranici modelu (50 hPa) a hodnôt σ v strede vrstiev pomocou rovnice 3.10. Priemerná teplota vo vrstve bola počítaná ako priemer teplôt na spodnej a vrchnej ploche vrstvy, ktoré sú poskytované na výstupe modelu RegCM.

6.3.2 Výsledky validácie

Výsledky validácie pre ozón

Priemerné sezónne koncentrácie ozónu boli vypočítané celkovo pre 42 EMEP staníc, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.13. Hodnoty sezónnych priemerov koncentrácie zo všetkých staníc v zime a v lete sú pre ilustráciu zobrazené na obr. 6.1. Porovnanie staničných a modelových sezónnych priemerov koncentrácií zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) vo všetkých 4 sezónach pomocou rozptylových diagramov je zobrazené na obr. 6.26. Z diagramov je na prvý pohľad možné konštatovať, že model má vo všetkých 4 sezónach a vo všetkých simuláciách tendenciu spravidla viac či menej podhodnocovať priemerné koncentrácie na vyššie položených staničiach (t. j. nad 550 m n. m.), kým na nižšie položených staničiach (t. j. pod 550 m n. m.) má naopak tendenciu ich viac či menej nadhodnocovať. Tieto závery je možné nahliadnúť aj z obr. 6.1, z ktorých je navyše zreteľne vidieť, že výrazné podhodnotenia modelom sú späté s vysokohorskými stanicami (napr. na stanici Chopok na Slovensku či Krvavec v Slovinsku). Z rozptylových diagramov je ďalej vidieť, že v zimnej a v jarnej sezóne model v simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) oproti simuláciám CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4) pomerne slušne vystihuje koncentrácie na väčšine nižšie položených staníc v západnej a vo východnej Európe (v južnej Európe ich vo všetkých 4 simuláciách nadhodnocuje), no v letnej aj v jesennej sezóne model spravidla nadhodnocuje koncentrácie aj na týchto staničiach. Súčasne, všetky sezónne priemery s výnimkou 2 staníc v západnej Európe počas jesene sú modelom predikované tak, že ich nadhodnotenie (podhodnotenie) nepresahuje dvojnásobok (polovicu) hodnoty staničných priemerov.

Priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie ozónu v jednotlivých sezónach, ktoré boli stanovené z nižšie položených staníc (označených v tab. 6.13 zvýrazneným písmom), sú zobrazené na obr. 6.27 (a) – (d). Na ich základe je možné všeobecne konštatovať, že model vo všetkých sezónach v priemere lepšie zachytáva denný chod hodinových koncentrácií na týchto staničiach v simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) oproti simuláciám CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). Vo všetkých sezónach je pritom vidieť, že model vo všetkých simuláciách v priebehu dňa v priemere väčšinou nadhodnocuje hodinové koncentrácie, a to výraznejšie v nočných hodinách. K obzvlášť výrazným nadhodnoteniam v nočných hodinách (presahujúcim v priemere i viac ako $15 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) dochádza v letnej a v jesennej sezóne. V denných hodinách sa veľkosť nadhodnotenia modelom v simuláciách znižuje (výraznejšie v zime a na jar, menej výrazne na jeseň), pričom minimum dosahuje v poobedných hodinách. V jarnej sezóne dochádza v poobedných hodinách v priemere dokonca k miernemu podhodnoteniu hodinových koncentrácií v simulácii CAMx (PHA1). Uvedené priemerné chody súčasne sčasti osvetľujú dôvody nadhodnotenia priemerných modelových sezónnych priemerov koncentrácie na nižšie položených staničiach v rozptylových diagramoch.

Priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie ozónu v Európe a v jej regiónoch, ktoré boli stanovené z nižšie položených staníc, sú zobrazené na obr. 6.27 (e) – (h). V rámci celej Európy je vidieť, že model vo všetkých štyroch simuláciách v priemere nadhodnocuje mesačné koncentrácie, a to výraznejšie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). V simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) sú pomerne slušne zachytené mesačné koncentrácie v zimných

a v jarných mesiacoch, no v letných a v jesenných mesiacoch sú už výraznejšie nadhodnotené. Obdobné závery o ročných chodoch platia aj v západnej Európe. V regióne východnej Európy sú priemerné mesačné koncentrácie mierne podhodnotené v simulácii CAMx (PHA1) od januára do apríla a taktiež v decembri, v simulácii CAMx (PHA2) od januára do marca. V ostatných mesiacoch sú mesačné priemery v oboch simuláciách nadhodnotené. Zároveň, v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4) sú mesačné priemery nadhodnotené počas roka voči tým zo simulácií CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3). V regióne južnej Európy sú mesačné priemery vo všetkých simuláciách nadhodnotené voči staničným, a to opäť výraznejšie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). Súčasne, nadhodnotenia v zimných a v jesenných mesiacoch sú výraznejšie ako v mesiacoch jarných a letných. Na základe ročných chodov je taktiež možné sčasti objasniť systematické odklony simulovaných sezónnych priemerov koncentrácie na nižšie položených staniaciach v rozptylových diagramoch.

Porovnanie počtu dní s prekročeným imisným limitom v roku 2007 v simuláciách CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) a na všetkých EMEP staniaciach je zobrazené na obr. 6.28 a taktiež vynesené do rozptylových diagramov, ktoré sú zobrazené na obr. 6.29. Z týchto porovnaní je vidieť, že model má vo všetkých simuláciách tendenciu výrazne podhodnocovať počty dní na vyššie položených staniaciach v celej Európe (obzvlášť výrazne opäť na vysokohorských staniaciach, ako napr. na Chopku či na Krvavci). Na základe tohto záveru a berúc do úvahy definíciu imisného limitu pre ozón je možné konštatovať, že model má tendenciu systematicky podhodnocovať maximá koncentrácie na vyššie položených staniaciach, čo sa samozrejme sčasti premieta i do podhodnotenia sezónnych priemerov v rozptylových diagramoch. Výsledky pre stanice v nižších polohách ukazujú, že model má vo všetkých simuláciách tendenciu niektoré z nich nadhodnocovať, ďalšie podhodnocovať. Napríklad na staniaciach v Spojenom kráľovstve, v Beneluxe, v severnom Nemecku či v Šandinávii sú určené pomerne presne, v Českej republike, ako aj na Slovensku sú modelom podhodnocované.

Výsledky štatistického porovnania staničných a modelových denných koncentrácií ozónu z nižšie položených staníc v rámci celého roka 2007 i v jeho sezónach sú zobrazené v tab. 6.19 a 6.20, a to ako pre stanice z celej Európy, tak aj pre stanice v jednotlivých regiónoch. Uvedené hodnoty ukazovateľov pritom reprezentujú priemery ich hodnôt z jednotlivých staníc. Z porovnania hodnôt všetkých 5 ukazovateľov s tými, ktoré by v ideálnom prípade mali nadobúdať, je možné konštatovať, že model v rámci celého roka i v jeho väčšine sezón vystihuje variabilitu denných priemerov koncentrácie ozónu v celej Európe i v jej jednotlivých regiónoch presnejšie v simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) ako v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). Z tohto dôvodu budú ďalej popísané výsledky len pre prvú z uvedených dvojíc. Hodnoty všetkých ročných i väčšiny sezónnych korelačných koeficientov dosahujú v rámci Európy i jej regiónov vyšších hodnôt v simulácii CAMx (PHA3), a to v rozmedzí 0,47 – 0,68. Naopak, väčšina sezónnych FB i všetky ročné FB sú v rámci Európy i jej regiónov menšie v simulácii CAMx (PHA1), a to v rozmedzí -28 – 5 %. Kladnú hodnotu FB dosahuje len jednom prípade, a to v zimnej sezóne vo východnej Európe, čo poukazuje na tendenciu modelu väčšinou v priemere nadhodnocovať denné koncentrácie. Hodnoty $RMSE$ sú v oboch simuláciách väčšinou podobné: v ročnom priemere zo všetkých staníc Európy dosahuje $RMSE$ pre simuláciu CAMx (PHA1), resp.

CAMx (PHA3) hodnotu 22,65; resp. 22,68 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; v sezónnom priemere zo všetkých staníc Európy sú *RMSE* v simulácii CAMx (PHA3) menšie ako v CAMx (PHA1) v zimnej a v jarnej sezóne. *NMSE* v ročnom priemere nadobúda rovnakú hodnotu pre obe simulácie, konkrétne 0,14; v sezónnom priemere zo všetkých staníc Európy sú *NMSE* v simulácii CAMx (PHA3) menšie ako v CAMx (PHA1) v zimnej a jarnej sezóne, v sezóne letnej sú rovnaké. Všetky hodnoty ročných, ako aj sezónnych priemerov *NSD* sú v rámci Európy i jej regiónov pre obe simulácie menšie ako 1, čo poukazuje na to, že model v priemere podhodnocuje variabilitu denných priemerov koncentrácie voči staničným meraniam. V ročnom priemere zo všetkých staníc Európy sú *NSD* rovnaké pri oboch simuláciách, konkrétne 0,86; v sezónnom priemere zo všetkých staníc Európy sú *NSD* väčšie s výnimkou letnej sezóny pre simuláciu CAMx (PHA3).

Výsledky validácie pre oxid dusičitý

Priemerné sezónne koncentrácie oxidu dusičitého boli stanovené celkovo pre 29 EMEP staníc, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.14. Pre ilustráciu sú hodnoty týchto priemerov zo všetkých staníc v zime a v lete zobrazené na obr. 6.8. Porovnanie staničných a modelových sezónnych priemerov zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) vo všetkých 4 sezónach pomocou rozptylových diagramov je zobrazené na obr. 6.30. V zimnej sezóne je z diagramov možné konštatovať, že model vo všetkých 4 simuláciách nadhodnocuje (podhodnocuje) sezónny priemer pre väčšinu staníc do dvojnásobku (polovice) hodnoty staničných priemerov. K nadhodnoteniam ešte výraznejším dochádza len na 2 vyššie položených staniaciach vo východnej Európe: na Chopku a na Snežke. Súčasne je vidieť, a to nielen v zimnej, ale vo všetkých sezónach, že model viac či menej podhodnocuje koncentrácie v južnej Európe a pomerne slušne zachytáva koncentrácie na vyššie položených staniaciach v západnej Európe. V jarnej a ešte výraznejšie v letnej sezóne model nadhodnocuje (podhodnocuje) sezónne koncentrácie na staniaciach vo východnej Európe menej (viac) ako v sezóne zimnej.

Priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie oxidu dusičitého v jednotlivých sezónach, ktoré boli stanovené z nižšie položených staníc (označených v tab. 6.14 zvýrazneným písmom a hviezdíčkou), sú zobrazené na obr. 6.31 (a) – (d). Z nich je možné konštatovať, že model v simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) počas zimnej sezóny pomerne slušne (s miernym nadhodnotením) vystihuje priemerné hodinové koncentrácie s výnimkou denných hodín (8 – 18 h UT), v ktorých ich podhodnocuje, a to najvýraznejšie v popoludňajších hodinách. Súčasne, v oboch simuláciách dochádza zhruba k dvojhodinovému oneskoreniu nástupu ranného maxima koncentrácie. Denné chody v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4), i keď tvarovo zachytávajú staničné chody, podhodnocujú priemerné hodinové koncentrácie v priebehu celého dňa. V ostatných 3 sezónach model v simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) výraznejšie nadhodnocuje priemerné hodinové koncentrácie v nočných hodinách a naopak výraznejšie ich podhodnocuje v hodinách denných. Zároveň, v modeli dochádza k oneskoreniu poklesu koncentrácie z večerných hodín, ktoré je evidentné zo staničných meraní, až na nočné hodiny (po polnoci). V simuláciách je CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4) sú denné chody tvarovo podobné tým zo simulácií CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3), no vykazujú systematický odklon k nižším koncentráciám vo večerných a nočných hodinách.

Priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie oxidu dusičitého v Európe a v jej regiónoch, ktoré boli stanovené z nižšie položených staníc (označených v tab. 6.14 zvýrazneným písmom), sú zobrazené na obr. 6.31 (e) – (h). Hodnoty mesačných priemerov koncentrácie zo všetkých staníc ukazujú, že model ich vo všetkých 4 simuláciách podhodnocuje, a to výraznejšie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). Analogické chody určené zo staníc v jednotlivých regiónoch poukazujú, že na tomto celkovom podhodnotení sa najvyššou mierou podieľajú stanice vo východnej a v južnej Európe. Zároveň je vidieť, že na staniaciach v západnej Európe model s výnimkou neskorších mesiacov (október – december) pomerne slušne vystihuje priemerný ročný chod v simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3).

Výpočet prekročenia imisného limitu oxidu dusičitého zo staničných dát ukázal, že nebol prekročený ani na jednej z nich. Rovnako nebol prekročený ani na jednej modelovej stanici vo všetkých 4 simuláciách.

Výsledky štatistického porovnania staničných a modelových denných koncentrácií oxidu dusičitého z nižšie položených staníc v rámci roka 2007 i v jeho sezónach sú zobrazené v tab. 6.21 a 6.22, a to ako pre stanice z celej Európy, tak aj pre stanice v jednotlivých regiónoch. Hodnoty korelačných koeficientov poukazujú všeobecne na nízku mieru korelacie modelových a staničných priemerov vo všetkých simuláciách: vo väčšine prípadov sú ich hodnoty menšie než 0,4 (vyšších hodnôt dosahujú najmä pre stanice v južnej Európe, kde sú všetky vyššie ako 0,5), čo sa dalo z porovnania denných chodov očakávať. *FB* sú vo všetkých porovnaníach nižšie pre simulácie CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) ako pre CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4), pričom okrem jedného prípadu (v západnej Európe počas jari) nadobúdajú kladných hodnoty (t. j. model má v priemere tendenciu koncentrácie podhodnocovať). V ročnom priemere zo všetkých staníc Európy dosahuje *FB* pre simuláciu CAMx (PHA1), resp. CAMx (PHA3) hodnotu 29, resp. 28 %; v sezónnom priemere zo všetkých staníc sú *FB* v oboch týchto simuláciách menšie v zime a na jar (16 – 23 %) ako v lete a na jeseň (30 – 61 %). Hodnoty *RMSE* v ročnom priemere zo všetkých staníc, ktoré sa medzi všetkými 4 simuláciami príliš nelíšia, sa pohybujú v intervale 9,26 – 9,43 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; v sezónnom priemere zo všetkých staníc dosahujú *RMSE* vyšších hodnôt v zime a na jeseň (9,58 – 11,07 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) ako na jar a v lete (7,27 – 8,47 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$). Hodnoty všetkých ročných i väčšiny sezónnych *NMSE* sú menšie pre simulácie CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3), pre ktoré nadobúdajú v ročnom priemere zo všetkých staníc hodnoty 1,06 a 1,05. Ročné priemery *NSD* zo všetkých staníc sú pre všetky simulácie väčšie ako 1: ležia v intervale 1,01 – 1,19. Obdobne je tomu tak i v západnej Európe (1,20 – 1,41), no vo východnej, resp. južnej Európe sú menšie ako 1 (0,66 – 0,84, resp. 0,45 – 0,64; t. j. model v týchto prípadoch podhodnocuje variabilitu denných priemerov koncentrácie voči staničným meraniam).

Polia priemerných sezónnych stĺpcových koncentrácií troposférického oxidu dusičitého určené z modelových a družicových dát sú zobrazené v tab. 6.32. V zimnej sezóne, ktorá bola kvôli chybe v súbore obsahujúcom februárové piermey vypočítana len z mesiacov január a december, sú modelové koncentrácie výraznejšie podhodnotenú (zhruba dvojnásobne) v oblasti Pádskej nížiny; naopak výraznejšie nadhodnotenú sú obzvlášť v oblasti Beneluxu a Porúria (i viac ako dvojnásobne), no taktiež v oblastiach južného Poľska či východného Anglicka. Obdobnú situáciu ako v sezóne zimnej je možné konštatovať aj vo zvyšných troch sezónach,

kde však s výnimkou oblastí Beneluxu a Porúria nie sú evidentné až tak výrazné rozdiely.

Výsledky validácie pre oxid siričitý

Priemerné sezónne koncentrácie oxidu siričitého boli stanovené celkovo pre 25 EMEP staníc, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.15 a 6.16. Pre ilustráciu sú hodnoty týchto priemerov zo všetkých staníc v zime a v lete zobrazené na obr. 6.14. Porovnanie staničných a modelových sezónnych priemerov zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) vo všetkých 4 sezónach pomocou rozptylových diagramov je zobrazené na obr. 6.33. Rozptylové diagramy ukazujú, že model s výnimkou niekoľkých staníc najmä v južnej Európe výrazne nadhodnocuje sezónne priemery (prekračujúc dvojnásobok staničných hodnôt) v priebehu celého roka vo všetkých 4 simuláciách. Na túto skutočnosť poukazujú i priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie, ktoré sú zobrazené na obr. 6.34 (a) – (d), ako aj priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie v celej Európe a v jej západnom a východnom regióne, ktoré sú zobrazené na obr. 6.34 (e) – (g). Priemerný ročný chod v južnej Európe (obr. 6.34 (h)) ukazuje, že jedine v tomto regióne sú mesačne priemery modelom zachytené presnejšie, čo osvetľuje i menší rozptyl sezónnych priemerov na týchto staniaciach. Uvedené výrazné nadhodnocovanie modelu v západnej a vo východnej Európe bude s najväčšou pravdepodobnosťou spôsobené nadhodnotením hodinových emisií vo vstupných dátach. Vzhľadom k tejto skutočnosti zrejme nemá príliš valný význam posudzovať, ktorá zo simulácií vystihuje staničné merania v rámci celej domény presnejšie. I napriek tomu boli vypočítané štatistické ukazovatele medzi staničnými a modelovými dennými koncentraciami z nižšie položených staníc aj v tomto prípade a sú uvedené v tab. 6.23 a 6.24. Ich hodnoty len dokazujú vyššie zmienené závery. Výpočet prekročenia imisného limitu oxidu siričitého zo staničných dát ukázal, že nebol prekročený ani na jednej zo staníc. Limit nebol taktiež prekročený ani na jednej modelovej stanici vo všetkých 4 simuláciách.

Výsledky validácie pre PM_{2,5}

Priemerné sezónne koncentrácie PM_{2,5} boli stanovené celkovo pre 36 vidieckych staníc z databázy AirBase, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.17 a 6.18. Pre ilustráciu sú hodnoty týchto priemerov zo všetkých staníc v zime a v lete zobrazené na obr. 6.20. Porovnanie staničných a modelových sezónnych priemerov zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) vo všetkých 4 sezónach pomocou rozptylových diagramov je zobrazené na obr. 6.35. Z nich je možné uzavrieť, že model má vo všetkých simuláciách tendenciu podhodnocovať sezónne koncentrácie v južnej Európe počas celého roka, no najvýraznejšie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4) počas leta, kde pre väčšinu týchto staníc nedosahujú modelové priemery ani polovičnú hodnotu staničných priemerov. Vo východnej i západnej Európe model predikuje vo všetkých 4 simuláciách sezónne priemery spravidla tak, že ich nadhodnotenie (podhodnotenie) nepresahuje dvojnásobok (polovicu) hodnoty staničných priemerov. Na obr. 6.20 je vidieť, že výraznejšie podhodnocuje najmä zimné priemery na staniaciach Věřňovice (v Českej republike), Cornale a Buttigliera d'Asti (obe v Taliansku). V každej sezóne sa ukazuje, že modelové koncentrácie zo simulácií CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4)

sú vo všetkých regiónoch nižšie ako tie zo simulácií CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3).

Priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie PM_{2,5} v jednotlivých sezónach, ktoré boli stanovené z nižšie položených staníc, sú zobrazené na obr. 6.36 (a) – (d). Ako je z nich vidieť, model v priemere podhodnocuje priemerné hodinové koncentrácie počas zimy vo všetkých simuláciách v priebehu celého dňa, a to výraznejšie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). Obdobne aj v ostatných sezónach sú podhodnotenia modelom výraznejšie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). V jarnej sezóne je priemerný denný chod pomerne slušne zachytený (väčšinou mierne podhodnotený) simuláciami CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3). V letnej sezóne dochádza v simulácií CAMx (PHA3) k miernemu nadhodnoteniu v nočných hodinách (1 – 6 h UT), v simulácií CAMx (PHA1) sú hodnoty priemeru v čase 3 – 6 h UT veľmi presné; nasledne však v oboch simuláciách dochádza k podhodnocovaniu priemeru, ktoré nadobúda maxima zhruba o 10 h UT. Na jeseň sú priemerné denné chody v oboch simuláciách takmer identické, pričom počas celého dňa podhodnocujú priemerný staničný chod s minimom podhodnotenia o 6 h UT. Práve uvedené závery pochopiteľne sčasti osvetľujú nižšie hodnoty sezónnych priemerov koncentrácie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4), ktoré sú evidentné v rozptylových diagramoch.

Priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie PM_{2,5} v Európe a v jej regiónoch, ktoré boli stanovené z nižšie položených staníc (označených v tab. 6.17 zvýrazneným písmom), sú zobrazené na obr. 6.36 (e) – (h). Z porovnania priemerov v rámci celej Európy je vidieť, že model ich vo všetkých simuláciách výraznejšie podhodnocuje (dosahujúc hodnôt až do 8 μg.m⁻³) v zimných mesiacoch a taktiež v marci a v novembri, pričom v rámci celého roka sú podhodnotenia výraznejšie v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). V ostatných mesiacoch sú priemerné podhodnotenia menšie, ba dokonca v simulácii CAMx (PHA3) ich model v apríli a v júni mierne nadhodnocuje, rovnako ako aj v apríli v simulácii CAMx (PHA3). Z priemerných chodov v jednotlivých regiónoch je evidentné, že na celoeurópskych priemerných podhodnoteniach i nadhodnoteniach sa stanice z rôznych regiónov podieľajú v rôznych sezónach odlišnou mierou.

K stanoveniu prekročenia imisného limitu PM_{2,5} boli pre ilustráciu zhotovené polia modelovej priemernej ročnej koncentrácie, do ktorých boli vynesené hodnoty týchto priemerov na jednotlivých staniaciach. Tie sú zobrazené na obr. 6.37 a poukazujú, že zo všetkých staníc bol imisný limit prekročený na troch z nich, a to konkrétne na už zmienených staniaciach: Věřňonice (ročný priemer: 34,9 μg.m⁻³), Cornale (29,5 μg.m⁻³) a Buttigliera d'Asti (28,0 μg.m⁻³). Na ich modelových ekvivalentoch nebol prekročený imisný limit ani v jedenej simulácii: najvyššie hodnoty dosiahli v simulácii CAMx (PHA3), a to konkrétne 15,3; 14,6 a 19,9 μg.m⁻³ (hodnoty sú uvedené v príslušnom poradí staníc); o zhruba 2 μg.m⁻³ nižšie hodnoty dosiahli v simulácii CAMx (PHA1) a v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4) dosiahli hodnôt ešte nižších.

Výsledky štatistického porovnania staničných a modelových denných koncentrácií PM_{2,5} z nižšie položených staníc v rámci roka 2007 i v jeho sezónach sú zobrazené v tab. 6.25 a 6.26, a to ako pre stanice z celej Európy, tak aj pre stanice v jednotlivých regiónoch. Korelačné koeficienty ukazujú na všeobecne nízku mieru korelácie: pohybujú v rozmedzí 0,18 – 0,54, pričom hodnoty vyššie sú dosahované v zimnej a v jarnej sezóne v rámci celej Európy, ako aj v regiónoch

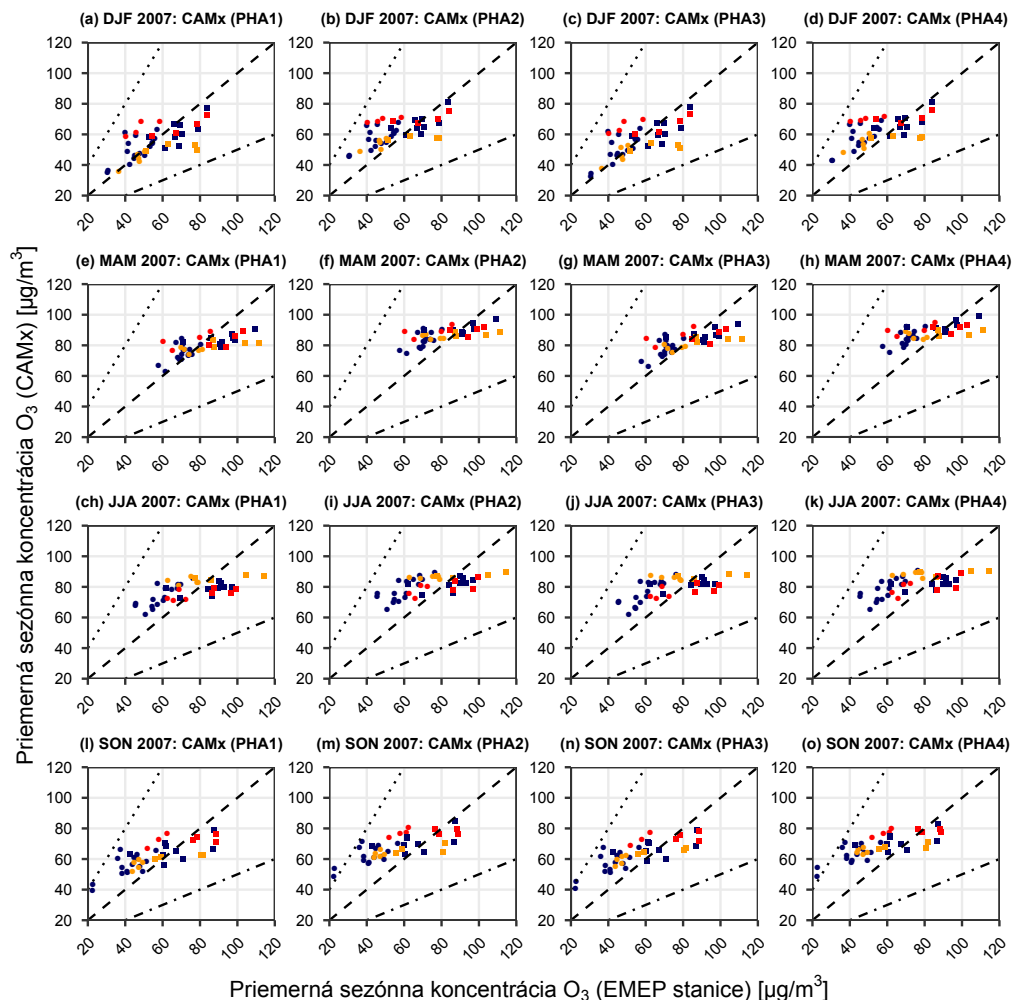
západnej a východnej Európe. Obdobne ako v prípade výsledkov pre koncentrácie ozónu, je z porovnania hodnôt ostatných 4 ukazovateľov s tými, ktoré by v ideálnom prípade mali nadobúdať, možné konštatovať, že model vo väčšine prípadov vystihuje ročnú i sezónnu variabilitu denných priemerov koncentrácie $PM_{2,5}$ v celej Európe i v jej jednotlivých regiónoch presnejšie v simuláciách CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3) ako v simuláciách CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). Preto budú opäť ďalej stručne zhrnuté výsledky len medzi simuláciami CAMx (PHA1) a CAMx (PHA3). Väčšina sezónnych FB i všetky ročné FB sú v rámci Európy i jej regiónov menšie v simulácii CAMx (PHA3), a to v rozmedzí -9 – 59%. Záporné hodnoty FB nadobúda iba dvoch prípadoch, a to na jar a v lete v západnej Európe, čo ukazuje na tendenciu modelu väčšinou v priemere podhodnocovať denné koncentrácie. Hodnoty $RMSE$ sú v oboch simuláciách podobné: v celoeurópskom ročnom priemere má $RMSE$ pre simuláciu CAMx (PHA1), resp. CAMx (PHA3) hodnotu 12,17; resp. 12,25 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$; v celoeurópskom sezónnom priemere sú $RMSE$ v simulácii CAMx (PHA3) menšie ako v CAMx (PHA1) v zimnej a v jesennej sezóne. $NMSE$ v ročnom priemere zo všetkých staníc nadobúda pre simuláciu CAMx (PHA1), resp. CAMx (PHA3) hodnotu 1,07; resp. 1,02; v celoeurópskom sezónnom priemere sú $NMSE$ s výnimkou jesennej sezóny menšie v simulácii CAMx (PHA3). Väčšina hodnôt ročných, ako aj sezónnych priemerov NSD sú v rámci Európy i jej regiónov pre obe simulácie menšie ako 1, a teda model v priemere väčšinou podhodnocuje variabilitu denných priemerov koncentrácie voči staničným meraniam. V celoeurópskom ročnom priemere je NSD pre simuláciu CAMx (PHA1), resp. CAMx (PHA3) rovná 0,75; resp. 0,78; v celoeurópskom sezónnom priemere sú NSD bližšie k 1 v zime a na jar pre simuláciu CAMx (PHA1), v lete a na jeseň pre simuláciu CAMx (PHA3).

6.4 Diskusia výsledkov

Výsledky analýzy jednoznačne poukazujú na rozdielnu a značne komplexnú sezónnu, výškovú i geografickú závislosť priemernej koncentrácie polutantov v porovnávaných simuláciách. Je jasné, že na základe porovnania samotných sezónnych priemerov nie je principiálne možné zhodnotiť, ktoré faktory a do akej miery sa na týchto výsledkoch v tom či onom regióne podieľajú. Preto nasledujúce tvrdenia je nutné brať len ako úvahy. Výsledky analýzy simulácií klímy ukázali, že bez ohľadu na použitú schému konvekcie dosahuje MVA v priebehu celého dňa počas zimnej i letnej sezóny na väčšine domény do vyšších výšok ako pri použití UW schémy. Z tohto záveru je možné usudzovať na výraznejšiu mieru turbulencie práve pri použití tejto schémy, ktorá je však podmiená geografickou polohou regiónov. Z porovania vertikálnych profilov priemernej sezónnej teploty ako aj špecifickej vlhkosti je taktiež možné usudzovať na intenzívnejšiu turbulentný prenos tepla i vodnej pary smerom od zemského povrchu pri použití Holtslagovej schémy (výraznejší v letnej sezóne a taktiež závisí od regiónov). Tieto skutočnosti by mohli čiastočne objasniť výraznejšie nižšie hodnoty koncentrácie oxidu dusičitého (a jemu odpovedajúce nadhodnotenia ozónu), ako aj nižšie koncentrácie $PM_{2,5}$ v najnižšej modelovej vrstve počas zimnej i letnej sezóny a súčasne i väčší odklon modelových priemerných denných i ročných chodov od staničných pre simulácie CAMx (PHA2) a CAMx (PHA4). Polia rozdielov sezónnych koncentrácií ozónu i oxidu dusičitého v najnižšej vrstve ukazujú, že zmeny schémy

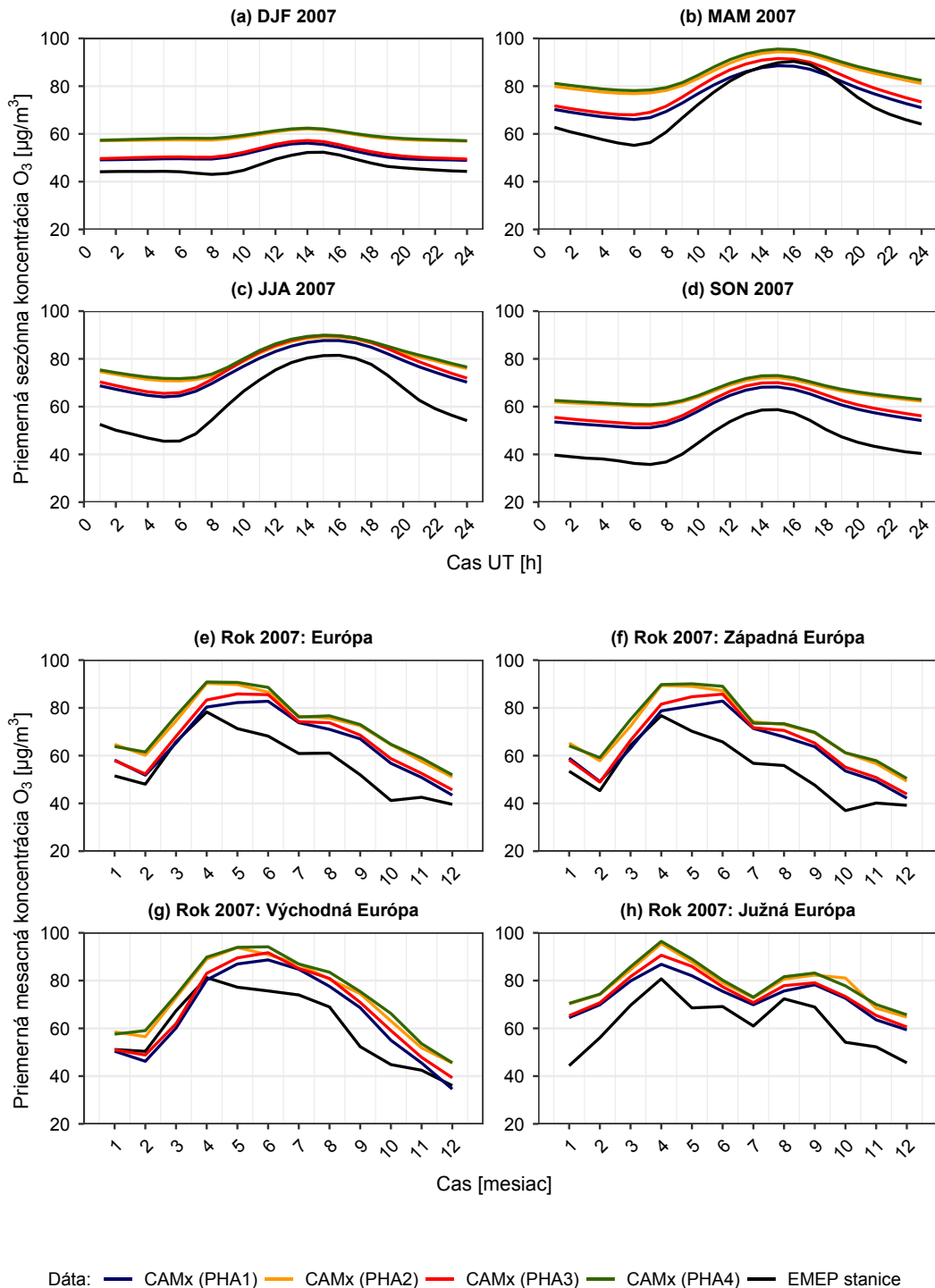
konvekcie zohrávajú spravidla menšiu rolu než zmeny MVA. V prípade aerosólov, avšak, sú v letnej sezóne koncentrácie nižšie v prípade použitia Tiedtkeho schémy. Na tomto výsledku by sa mohli podieľať zrážky (mokrú depozícia), ktoré sú pri jej použití vyššie takmer na celej doméne než v prípade Grellovej schémy.

Celkovú kvalitu simulácií ovplyvňuje mnoho faktorov. Prvým z nich je použité horizontálne rozlíšenie, ktoré je vzhľadom k uváženiu výraznej priestorovej variability polutantov pomerne hrubé. Súčasne sú ním znížené možnosti zachytenia georeliéfu a fyziografie domény, ako aj celkovej dynamiky v klimatických simuláciach. Ďalším je kvalita emisných vstupov do CHTM, čoho dôkazom sú s najväčšou pravdepodobnosťou nadhodnotenú hodnoty pre oxid siričitý. Ako tretí faktor je možné spomenúť neurčitosti plynúce zo spôsobu parametrizovania subgridových procesov v RCM, z konštrukcie použitých chemických mechanizmov v CHTM, ako aj zo spôsobu prepojenia oboch modelov. Celkovo je teda zrejmé, že simulácie sú zafaržené významnou miernou neurčitostí. I napriek tomu si myslím, že uvedené výsledky poskytujú cenné informácie.

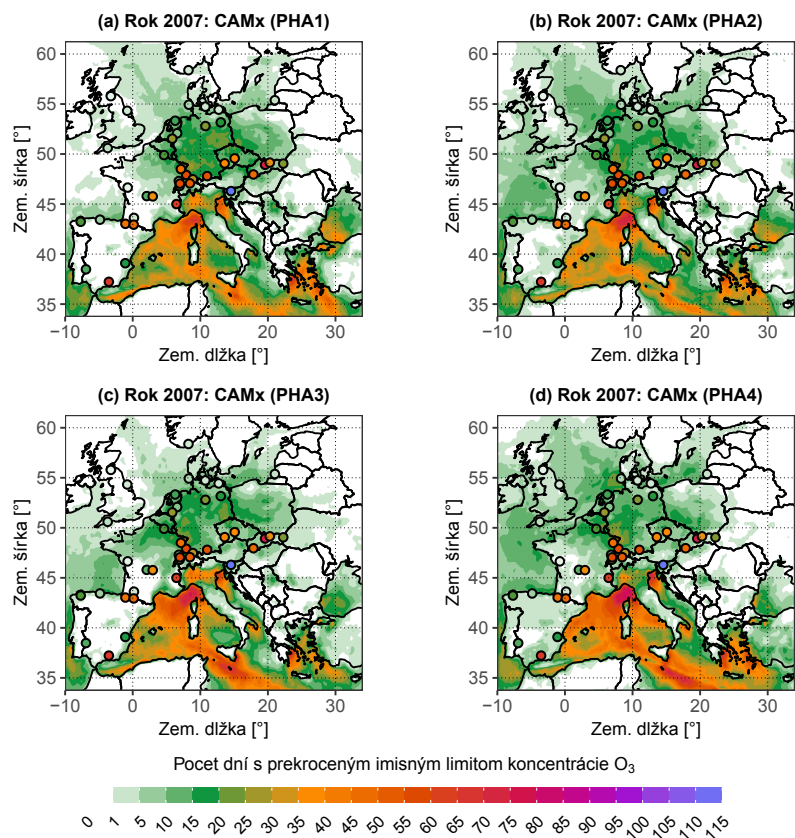


- | Región: | Stanice: |
|-------------------|-------------------|
| • Západná Európa | • do 550 m n. m. |
| • Východná Európa | • nad 550 m n. m. |
| • Južná Európa | |

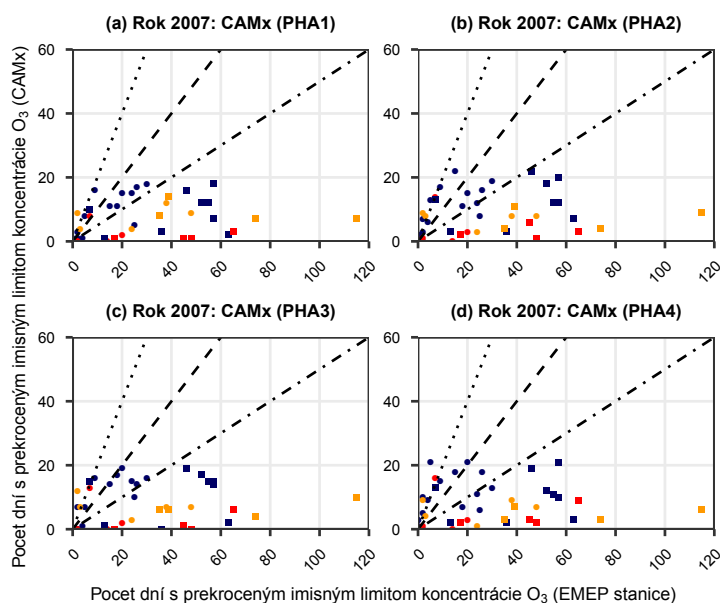
Obrázok 6.26: Rozptyľové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie ozónu v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007. Namerané hodnoty boli určené zo staničných meraní na vybraných EMEP staniaciach, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.13. Im prislúchajúce hodnoty modelové boli určené z koncentrácií v bodoch siete najnižšej modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k príslušným EMEP staniaciach, a to zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). Body v diagramoch sú farebne rozlíšené podľa regiónov Európy, do ktorých stanice spadajú, pričom modré reprezentujú stanice v západnej, oranžové vo východnej a červené v južnej Európe; resp. tvarovo podľa nadmorskej výšky staníc, kde krúžky, resp. štvorce reprezentujú stanice položené do 550, resp. nad 550 metrov nad morom (m n. m.). V diagramoch sú vynesené priamky: $y = x$ (prerušovaná čiara), $y = 2x$ (bodkovaná čiara) a $y = 0,5x$ (bodkočiarkovaná čiara), kde x , resp. y je vodorovná, resp. zvislá os.



Obrázok 6.27: Priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie O_3 v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007 (obr. a – d), resp. priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie O_3 v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (obr. e – h) určené ako aritmetické priemery príslušných chodov na vybraných EMEP staniách (čierne čiary) a ich ekvivalentov z najnižšej modelovej vrstvy v simulácii: CAMx (PHA1) – modré čiary, CAMx (PHA2) – oranžové čiary, CAMx (PHA3) – červené čiary, CAMx (PHA4) – zelené čiary. Prehľad použitých staníc je uvedený v tab. 6.13, geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.

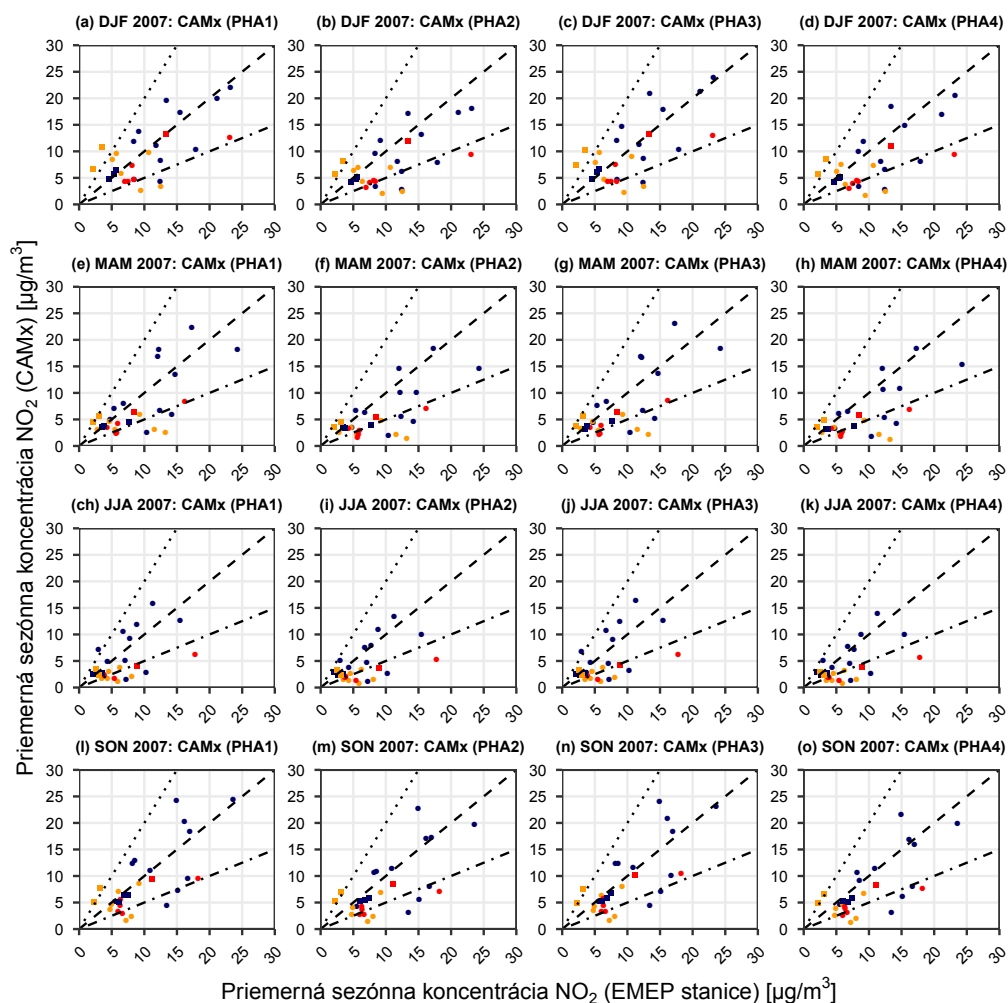


Obrázok 6.28: Polia počtu dní v roku 2007 s prekročeným imisným limitom koncentrácie O₃ v najnižšej modelovej vrstve určené zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). V poliach sú krúžkami zobrazené počty dní s prekročeným imisným limitom na vybraných EMEP staniách (vynesené v rovnakej farebnej škále ako sú modelové hodnoty).



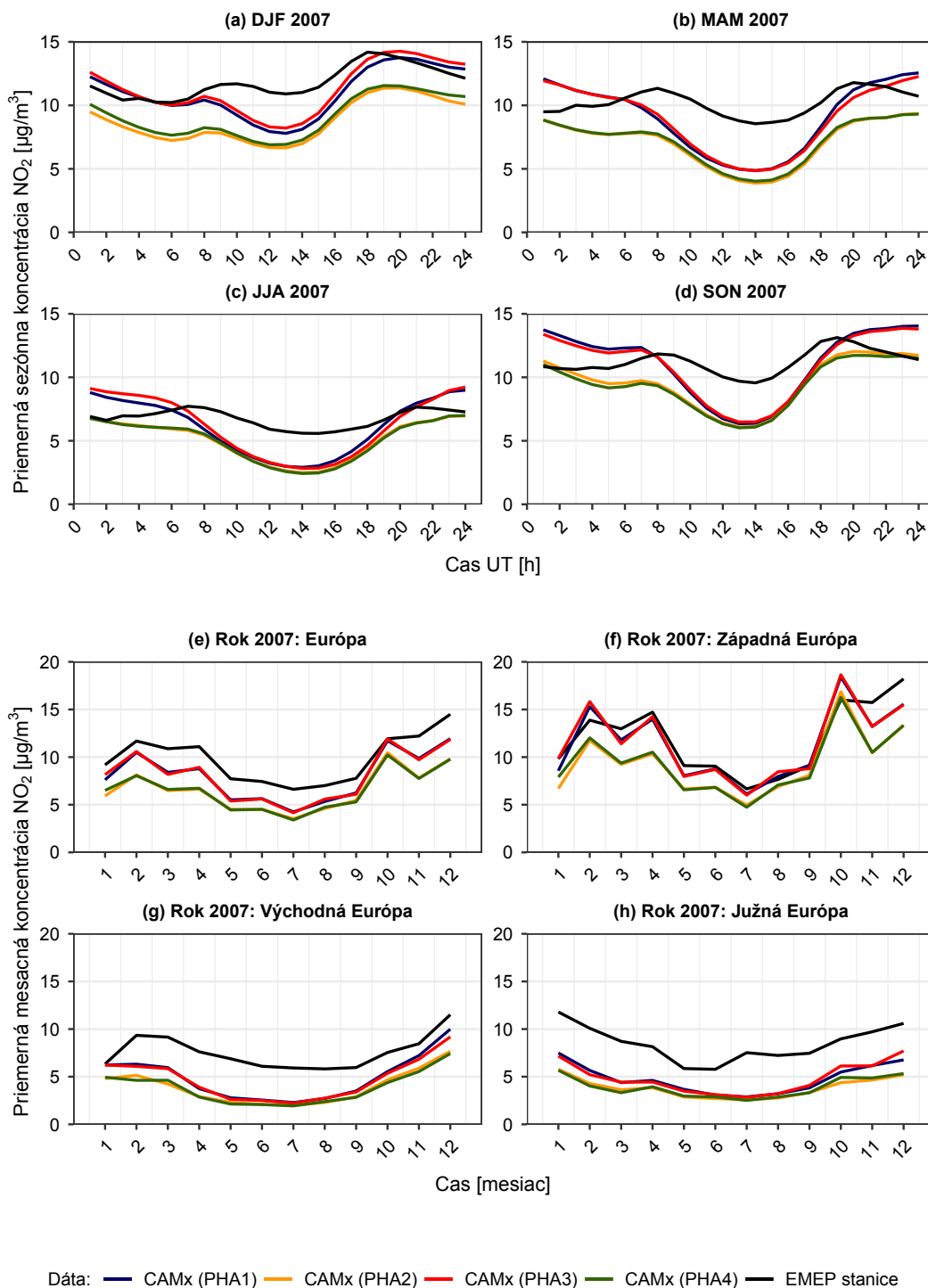
- | | |
|-------------------|-------------------|
| Región: | Stanice: |
| • Západná Európa | • do 550 m n. m. |
| • Východná Európa | • nad 550 m n. m. |
| • Južná Európa | |

Obrázok 6.29: Rozptylové diagramy počtu dní v roku 2007 s prekročeným imisným limitom koncentrácie O_3 . Pozorované počty boli určené zo staničných meraní na vybraných EMEP staniaciach, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.13. Im príslúchajúce počty modelové boli určené z koncentrácií v bodoch siete najnižšej modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k príslušným EMEP staniciam, a to zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). Body v diagramoch sú farebne rozlíšené podľa regiónov Európy, do ktorých stanice spadajú, pričom modré reprezentujú stanice v západnej, oranžové vo východnej a červené v južnej Európe; resp. tvarovo podľa nadmorskej výšky staníc, kde krúžky, resp. štvorce reprezentujú stanice položené do 550, resp. nad 550 metrov nad morom (m n. m.). V diagramoch sú vynesené priamky: $y = x$ (prerušovaná čiara), $y = 2x$ (bodkovaná čiara) a $y = 0,5x$ (bodkočiarkovaná čiara), kde x , resp. y je vodorovná, resp. zvislá os.

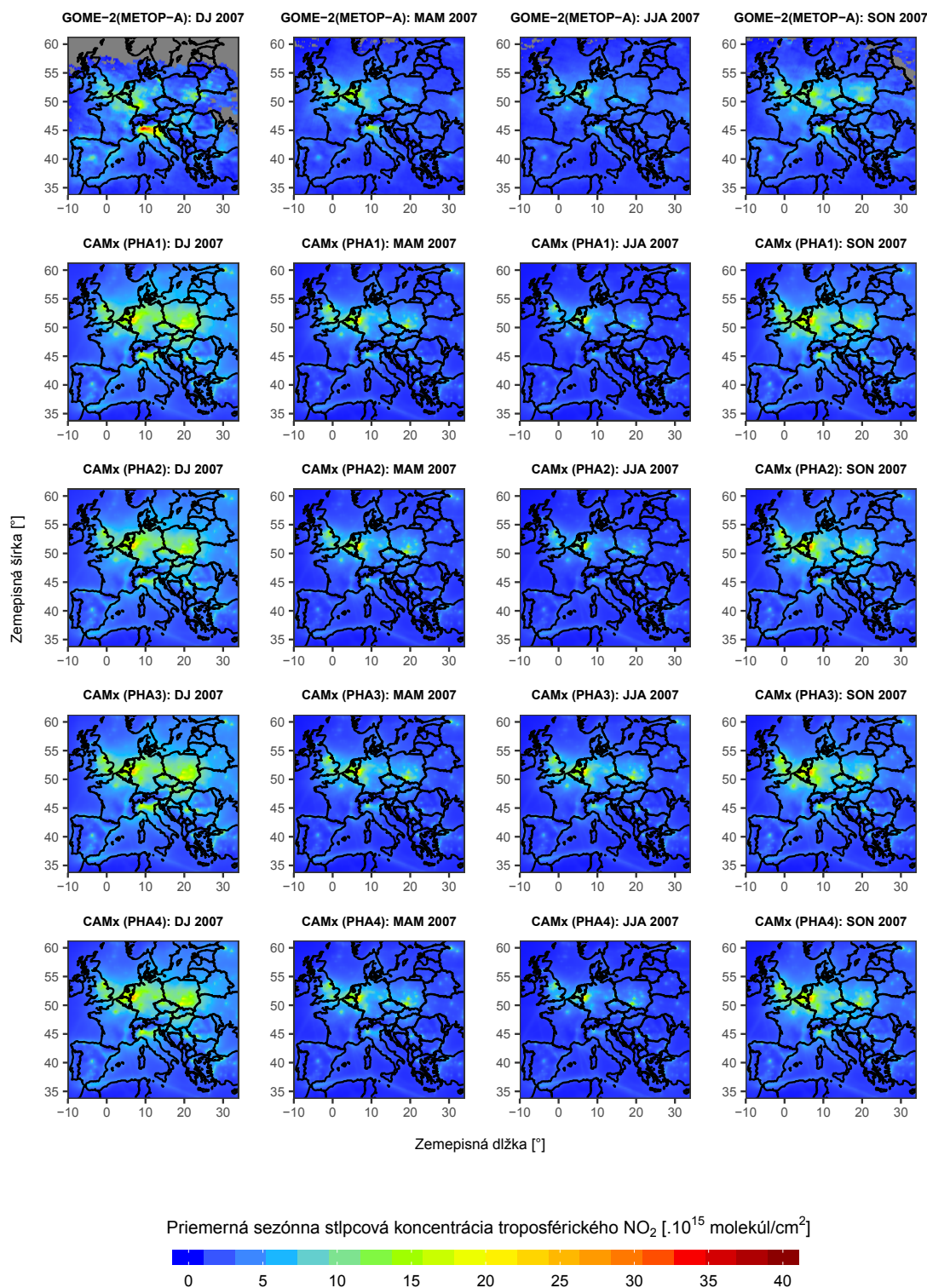


- | Región: | Stanice: |
|-------------------|-------------------|
| • Západná Európa | • do 550 m n. m. |
| • Východná Európa | • nad 550 m n. m. |
| • Južná Európa | |

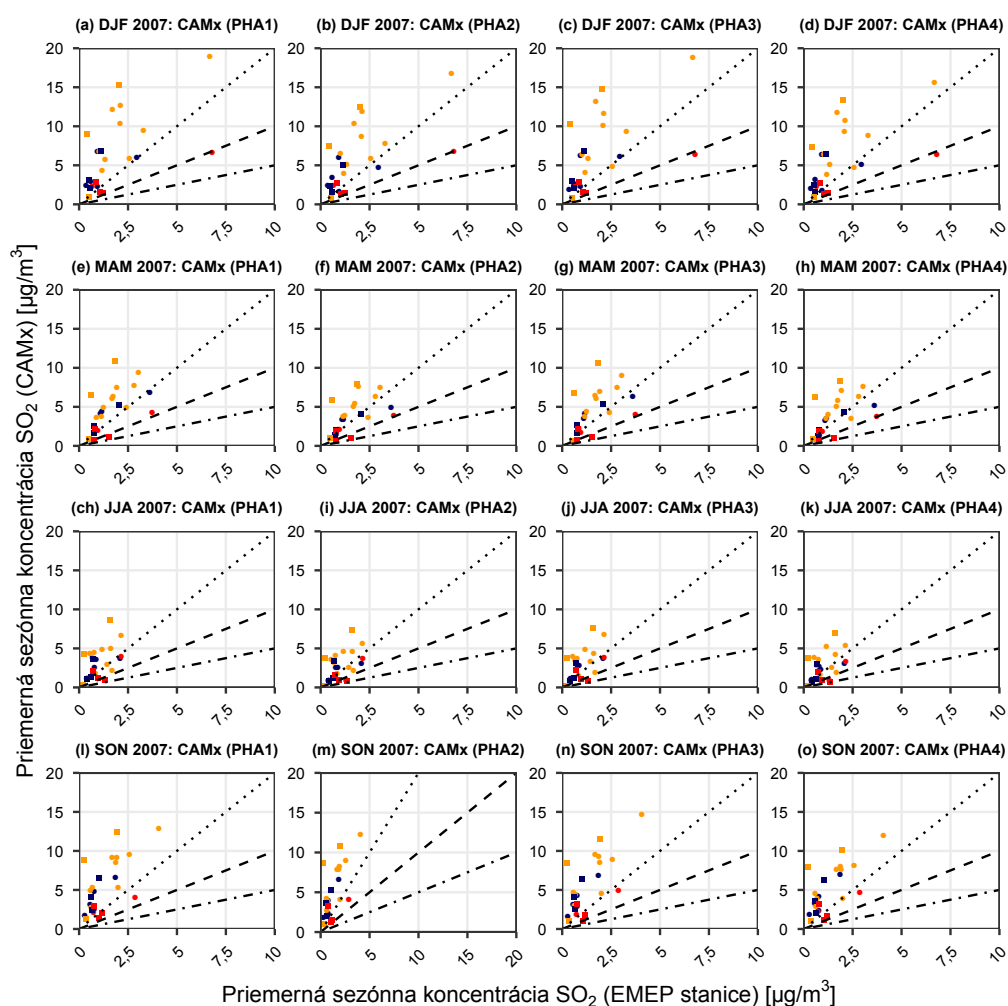
Obrázok 6.30: Rozptyľové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie oxidu dusičitého v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007. Namerané hodnoty boli určené zo staničných meraní na vybraných EMEP staniách, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.14. Im prislúchajúce hodnoty modelové boli určené z koncentrácií v bodoch siete najnižšej modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k príslušným EMEP staniám, a to zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). Body v diagramoch sú farebne rozlíšené podľa regiónov Európy, do ktorých stanice spadajú, pričom modré reprezentujú stanice v západnej, oranžové vo východnej a červené v južnej Európe; resp. tvarovo podľa nadmorskej výšky staníc, kde krúžky, resp. štvorce reprezentujú stanice položené do 550, resp. nad 550 metrov nad morom (m n. m.). V diagramoch sú vynesené priamky: $y = x$ (prerušovaná čiara), $y = 2x$ (bodkovaná čiara) a $y = 0,5x$ (bodkočiarkovaná čiara), kde x , resp. y je vodorovná, resp. zvislá os.



Obrázok 6.31: Priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie NO_2 v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007 (obr. a – d), resp. priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie NO_2 v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (obr. e – h) určené ako aritmetické priemery príslušných chodov na vybraných EMEP staniciach (čierne čiary) a ich ekvivalentov z najnižšej modelovej vrstvy v simulácii: CAMx (PHA1) – modré čiary, CAMx (PHA2) – oranžové čiary, CAMx (PHA3) – červené čiary, CAMx (PHA4) – zelené čiary. Prehľad použitých staníc je uvedený v tab. 6.14, geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.

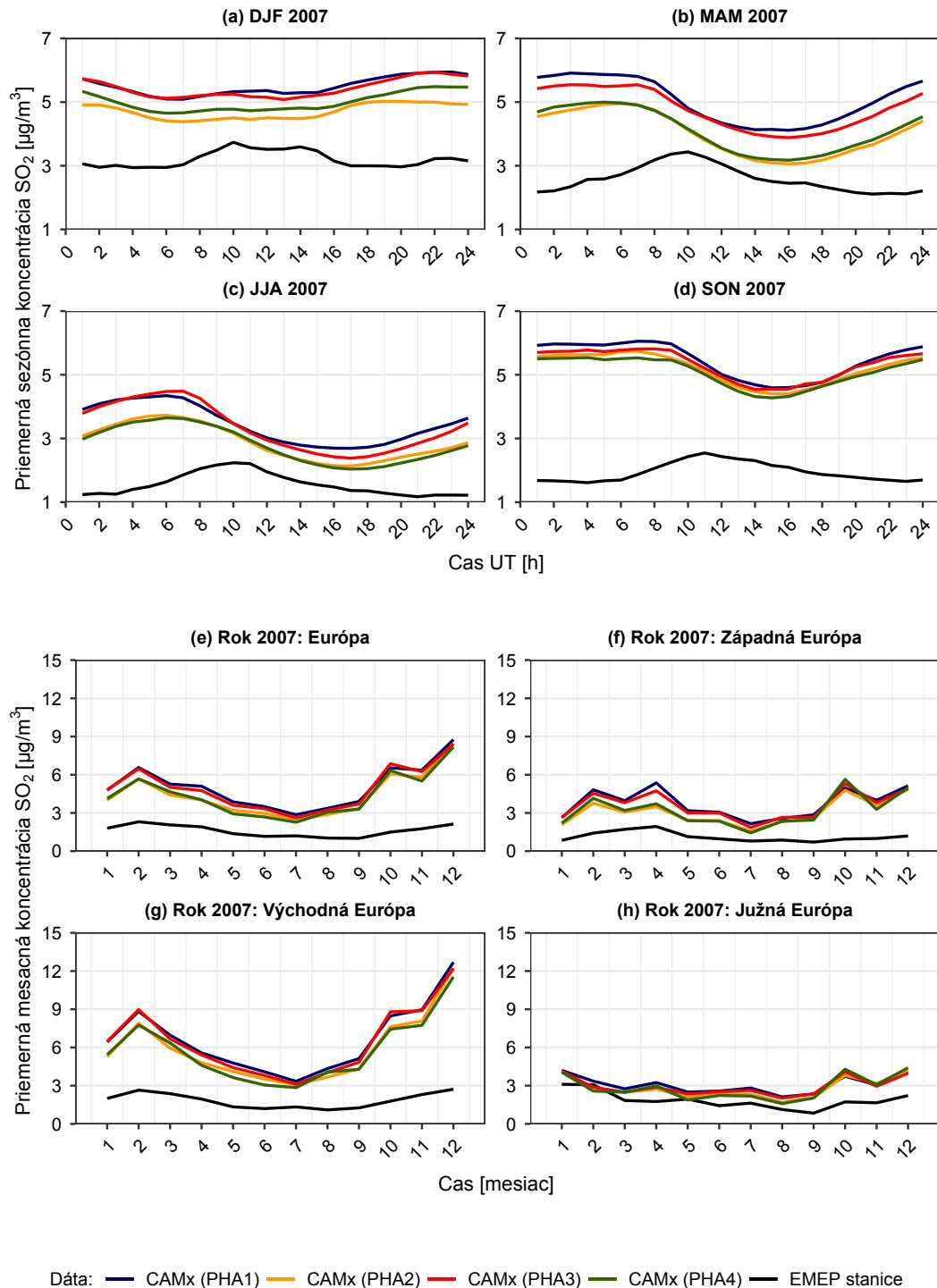


Obrázok 6.32: Polia priemerných sezónnych stĺpcových koncentrácií troposférického NO₂ v molekúlach.cm⁻² v zimnej (DJ; priemer bol vytvorený iba z mesiacov január a december), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007 určené zo simulácii CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4) a ich ekvivalentov z družicových dát. Použité družicové dáta sú produkty spracovania meraní zo spektrometra GOME-2 (*Global Ozone Monitoring Experiment-2*), ktorý je umiestnený na družici Metop-A (Boersma a kol., 2004).

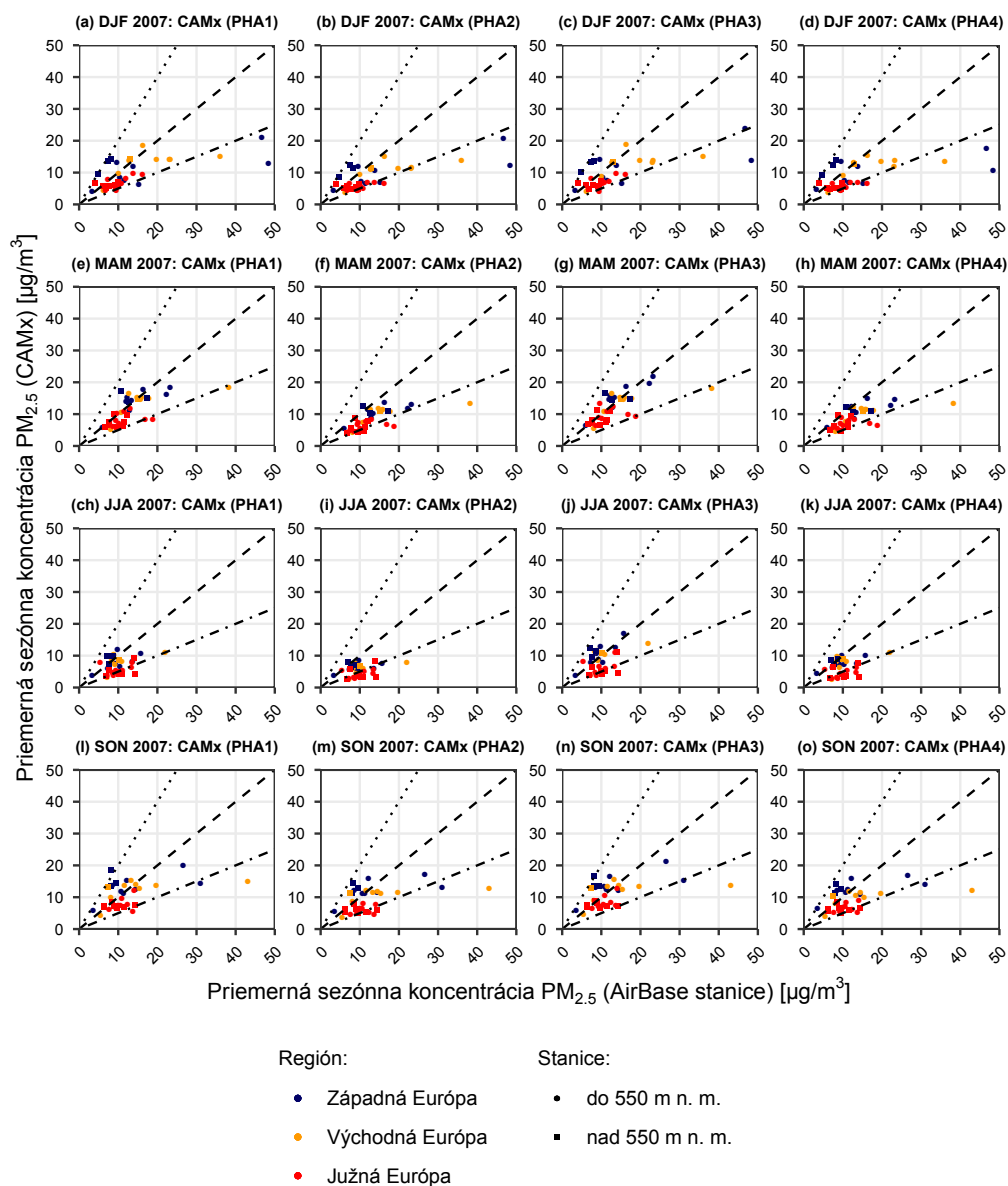


- | Región: | Stanice: |
|-------------------|-------------------|
| • Západná Európa | • do 550 m n. m. |
| • Východná Európa | • nad 550 m n. m. |
| • Južná Európa | |

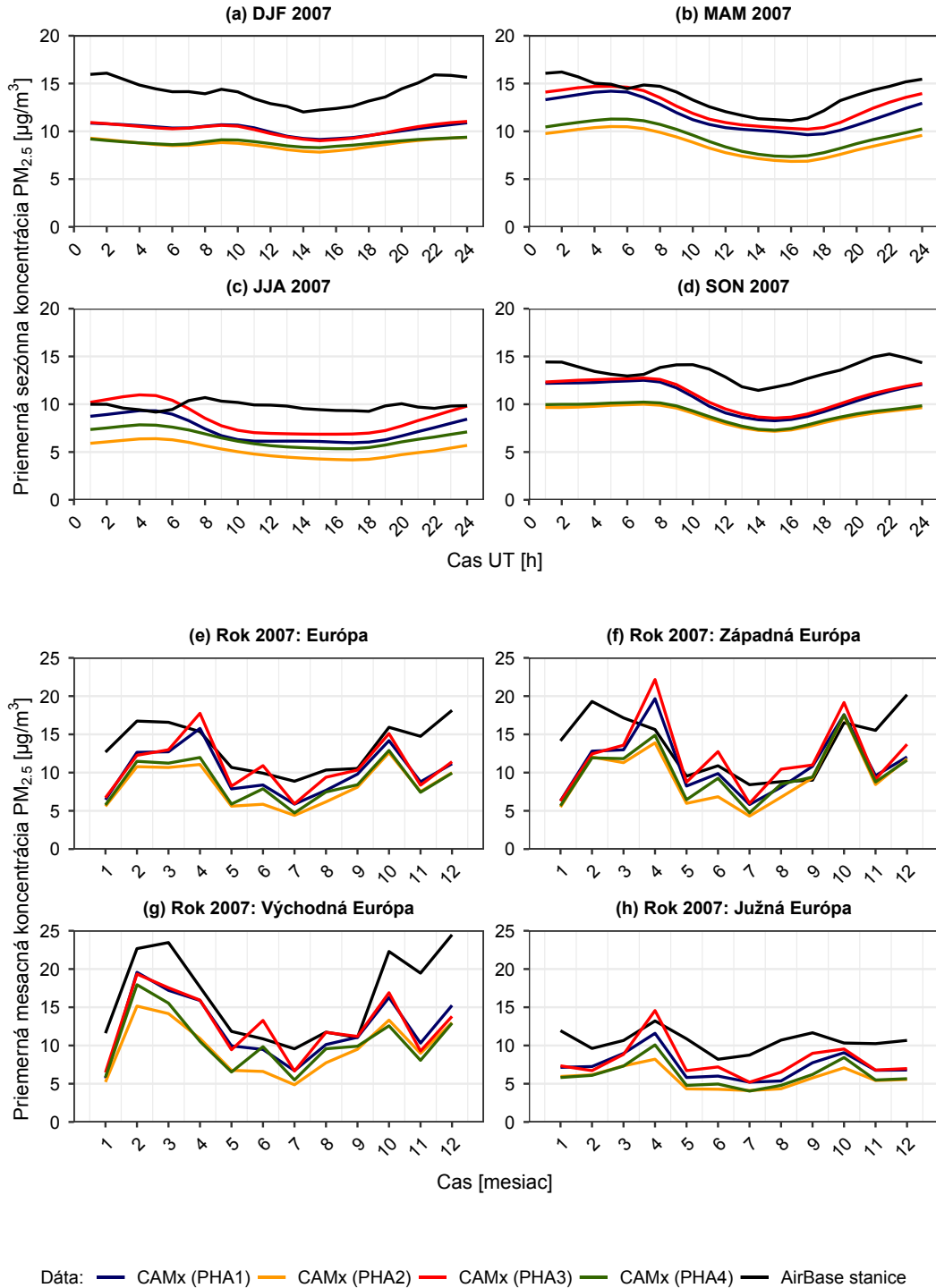
Obrázok 6.33: Rozptylové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie oxidu siričitého v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007. Namerané hodnoty boli určené zo staničných meraní na vybraných EMEP stanicích, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.15 a 6.16. Im prislúchajúce hodnoty modelové boli určené z koncentrácií v bodoch siete najnižšej modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k príslušným EMEP staniciam, a to zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). Body v diagramoch sú farebne rozlíšené podľa regiónov Európy, do ktorých stanice spadajú, pričom modré reprezentujú stanice v západnej, oranžové vo východnej a červené v južnej Európe; resp. tvarovo podľa nadmorskej výšky stanic, kde krúžky, resp. štvorce reprezentujú stanice položené do 550, resp. nad 550 metrov nad morom (m n. m.). V diagramoch sú vynesené priamky: $y = x$ (prerušovaná čiara), $y = 2x$ (bodkovaná čiara) a $y = 0,5x$ (bodkočiarkovaná čiara), kde x , resp. y je vodorovná, resp. zvislá os.



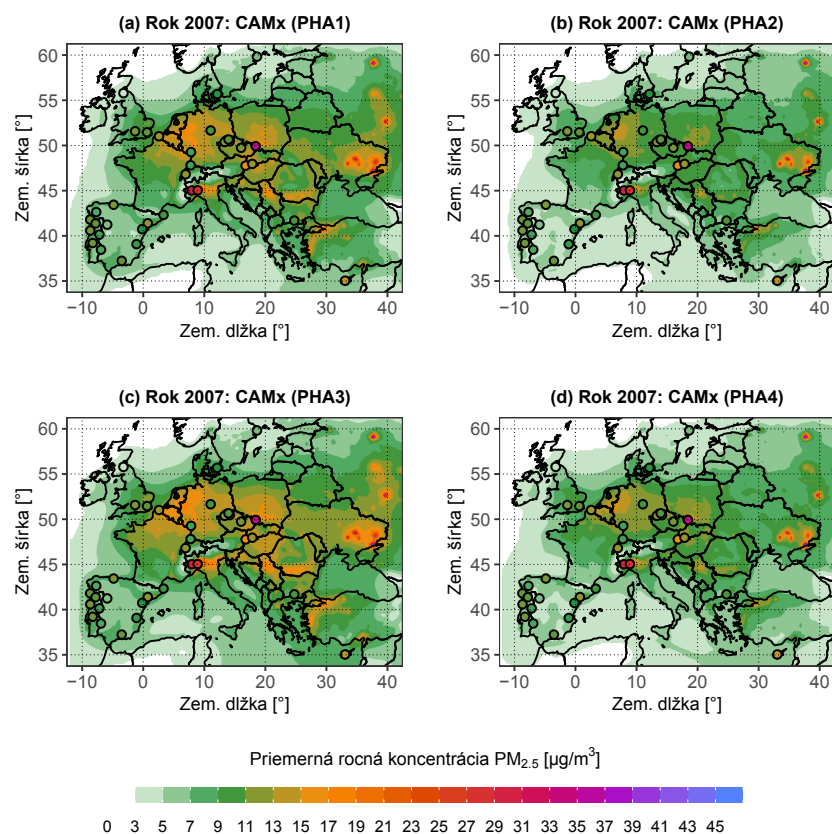
Obrázok 6.34: Priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie SO₂ v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007 (obr. a – d), resp. priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie SO₂ v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ (obr. e – h) určené ako aritmetické priemery príslušných chodov na vybraných EMEP staniciach (čierne čiary) a ich ekvivalentov z najnižšej modelovej vrstvy v simulácii: CAMx (PHA1) – modré čiary, CAMx (PHA2) – oranžové čiary, CAMx (PHA3) – červené čiary, CAMx (PHA4) – zelené čiary. Prehľad použitých staníc je uvedený v tab. 6.15 a 6.16, geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.



Obrázok 6.35: Rozptyľové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie $PM_{2.5}$ v $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007. Namerané hodnoty boli určené zo staničných meraní z databázy AirBase, ktorých zoznam je uvedený v tab. 6.17 a 6.18. Im prislúchajúce hodnoty modelové boli určené z koncentrácií v bodoch siete najnižšej modelovej vrstvy, ktoré sa geograficky nachádzajú najbližšie k príslušným staniciam, a to zo všetkých simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). Body v diagramoch sú farebne rozlíšené podľa regiónov Európy, do ktorých stanice spadajú, pričom modré reprezentujú stanice v západnej, oranžové vo východnej a červené v južnej Európe; resp. tvarovo podľa nadmorskej výšky staníc, kde krúžky, resp. štvorce reprezentujú stanice položené do 550, resp. nad 550 metrov nad morom (m n. m.). V diagramoch sú vynesené priamky: $y = x$ (prerušovaná čiara), $y = 2x$ (bodkovaná čiara) a $y = 0,5x$ (bodkočiarkovaná čiara), kde x , resp. y je vodorovná, resp. zvislá os.



Obrázok 6.36: Priemerné denné chody priemernej sezónnej koncentrácie PM_{2,5} v µg.m⁻³ v zimnej (DJF), jarnej (MAM), letnej (JJA) a jesennej (SON) sezóne 2007 (obr. a – d), resp. priemerné ročné chody priemernej mesačnej koncentrácie PM_{2,5} v µg.m⁻³ (obr. e – h) určené ako aritmetické priemery príslušných chodov na vybraných staniciach z databázy AirBase (čierne čiary) a ich ekvivalentov z najnižšej modelovej vrstvy v simulácii: CAMx (PHA1) – modré čiary, CAMx (PHA2) – oranžové čiary, CAMx (PHA3) – červené čiary, CAMx (PHA4) – zelené čiary. Prehľad použitých staníc je uvedený v tab. 6.17, geografické vymedzenie regiónov je uvedené v tab. 5.2.



Obrázok 6.37: Polia priemernej ročnej koncentrácie PM_{2,5} v µg.m⁻³ v roku 2007 v najnižšej modelovej vrstve určené zo simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4). V poliach sú krúžkami zobrazené (v rovnakej farebnej škále ako modelové hodnoty) priemerné ročné koncentrácie PM_{2,5} v µg.m⁻³ na staniciach z databázy AirBase.

Záver

Predmetom diplomovej práce bolo štúdium dopadov rôznych implementácií turbulencie a konvekcie v regionálnom klimatickom modeli RegCM (Regional Climate Model, verzia 4.6) na schopnosť prediktability chemického znečistenia troposféry v oblasti Európy, ktoré bolo simulované riadením chemického transportného modelu CAMx (Comprehensive Air quality Model with extensions, verzia 6.50) meteorologickými poliami z modelu RegCM pomocou offline prepojenia týchto dvoch modelov.

S cieľom komplexného objasnenia problemiky boli v prvej kapitole popísané základy troposférického chemizmu plynných polutantov i aerosólov. Následne, v kapitole druhej bolo formou diskusie stručne pojednané o vplyvoch počasia na zmeny koncentrácií polutantov. V kapitole tretej bolo pojednané o princípoch a problematike dynamického downscalingu pomocou regionálnych klimatických modelov. Rovnako v nej bol popísaný model RegCM 4.6 spolu s uvedením jeho nastavení, ktoré boli použité k vytvoreniu štyroch ročných simulácií (pre rok 2007) v oblasti Európy (centrovanej na Prahu) s horizontálnym rozlíšením 27 km. Súčasne boli uvedené dôvody vedúce práve k výberu oboch dostupných parametrizácií medznej vrstvy atmosféry (Holtslagovej a UW schémy), ako aj dvoch parametrizácií konvekcie (Tiedtkeho a Grellovej schémy). V nasledujúcej kapitole bol popísaný eulerovský chemický transportný model CAMx spolu s uvedením jeho nastavenia, ktoré bolo použité k simuláciám (napr. chemické mechanizmi: CB05, ISOROPIA, SOAP2.1). Následne boli zmienené všeobecné spôsoby prepojenia numerických modelov a na záver bol popísaný kľúčový element pri realizácii offline prepojenia oboch modelov – preprocesor RegCM2CAMx, ktorý vyvinul vedúci mojej práce.

Jadrom práce sú posledné dve kapitoly: prvá sa venovala validácii a analýze klimatických simulácií, druhá sa zaoberala analýzou a validáciou priemerných koncentrácií polutantov (O_3 , NO_2 , SO_2 , $PM_{2,5}$). Na začiatku každej z oboch kapitol boli zhrnuté spôsoby realizácie jednotlivých simulácií, rovnako v každej z nich boli popísané metodiky analýzy i validácie.

V rámci validácie klimatických simulácií boli porovnané priemerné denné teploty vzduchu, priemerné denné minimum/maximum teploty vzduchu a priemerný denný úhrn zrážok s dátami z databázy E-OBS počas všetkých sezón i počas celého roka. K vyhodnoteniu boli použité 3 štatistické ukazovatele: Pearsonov korelačný koeficient, stredná systematická chyba a odmocnina strednej kvadratickej chyby (*RMSE*). Počas sezón i celého roka je v Európe dosahovaná vysoká miera kladnej korelácie pre všetky tri teplotné prvky (0,86 – 0,90; 0,86 – 0,89; 0,79 – 0,84; hodnoty sú zoradené v uvedenom poradí prvkov), v centrálnej Európe je nižšia (0,65 – 0,74; 0,51–0,65; 0,50 – 0,65). Pre priemerný denný úhrn zrážok sú hodnoty väčšinou do 0,3. Hodnotenie systematickej chyby priemernej teploty vzduchu v Európe ukázalo, že modely s Holtslagovou schémou sú počas roka menej oklonené od pozorovaní, rovnaké hodnotenie pre priemerné denné maximum (minimum) ukázalo, že ich model vo všetkých štyroch simuláciách počas roka podhodnocuje (nadhodnocuje), a to výraznejšie pri použití UW (Holtslagovej) schémy. Porovnaním *RMSE* všetkých troch teplotných prvkov počas roka bolo zistené, že až na priemerné denné minimum sú menšie v simuláciách s Holtslago-

vou schémou. Pre sezónne i ročné priemery priemerných denných zrážok v (centrálnej) Európe sa ukázalo, že sú viac nadhodnotené pri použití Tiedtkeho schémy. Obdobne, ročné hodnoty *RMSE* priemerných denných zrážok sú v oboch regiónoch väčšie pre simulácie s Tiedtkeho schémou.

Z výsledkov analýzy klimatických stojí za zmienku zistenie, že bez ohľadu na použitú schému konvekcie siaha medzná vrstva počas celého dňa vyššie ako pri použití Holtslagovej schémy, čo naznačuje na výraznejšiu mieru turbulencie ako v prípade UW schémy. Ďalšími zaujímavými výsledkami sú vertikálne profily priemernej sezónnej teploty a špecifickej vlhkosti vzduchu porovnané medzi simuláciami s rovnakou schémou konvekcie, z ktorých je taktiež možné usudzovať na všeobecne výraznejší transport tepla a vodnej pary od zemského povrchu do vyšších vrstiev troposféry pri použití Holtslagovej schémy. Tieto závery kvalitatívne korešpondujú s tými, ktoré publikovali Güttler a kol. (2014).

Výsledky analýzy chemicko-transportných simulácií poukazujú na rozdielnu a značne komplexnú sezónnu, výškovú i geografickú závislosť priemernej koncentrácie polutantov v porovnávaných simuláciách, ktorá je podrobne popísaná v práci. Z porovnania sezónnych koncentrácií v najnižšej modelovej vrstve stoja za zmienku napríklad dopady medzi simuláciami, ktoré boli riadené z dát modelov klimatických s rozdielnou schémou medznej vrstvy (Holtslag - UW) a rovnakou schémou konvekcie, kde obzvlášť v zime dochádza k výrazným nadhodnoteniam koncentrácie O_3 a súčasne podhodnoteniam NO_2 i $PM_{2,5}$ (pri $PM_{2,5}$ aj lete).

K účelu validácie koncentrácií O_3 , NO_2 a SO_2 boli použité staničné merania z vidieckych staníc začlenených do programu EMEP, pre $PM_{2,5}$ boli použité stanice z databázy AirBase. Cieľom bolo zhodnotiť rozptyl modelových a staničných sezónnych koncentrácií, priemerný denný (ročný) chod sezónnych (mesačných) modelových a staničných koncentrácií, posúdiť prekročenie imisných limitov. Nedeľnou súčasťou validácie bolo i posúdenie modelových a časových radov denných koncentrácií pomocou štatistických ukazovateľov, ktorých bolo použitých celkovo 5, a to: Pearsonov korelačný koeficient, frakčná systematická chyba, normovaná stredná kvadratická chyba, normovaná štandardná odchýlka a *RMSE*.

Z rozptylových diagramov pre ozón je možné konštatovať, že model má vo všetkých štyroch simuláciách počas všetkých ročných sezón tendenciu spravidla viac či menej podhodnocovať priemerné koncentrácie na vyššie položených staniaciach (t. j. s nadmorskou výškou nad 550 m n. m.), kým na nižšie položených staniaciach (t. j. pod 550 m n. m.) má naopak tendenciu ich viac či menej nadhodnocovať. Súčasne, takmer pre všetky stanice sú sezónne priemery modelom predikované tak, že ich nadhodnotenie (podhodnotenie) nepresahuje dvojnásobok (polovicu) hodnoty staničných priemerov. Porovnaním počtu dní s prekročeným imisným limitom bolo zistené, že model má vo všetkých simuláciách tendenciu výrazne podhodnocovať počty dní na vyššie položených staniaciach v celej Európe. Na základe porovnania všetkých 5 štatistických ukazovateľov sa ukázalo, že model počas celého roka i v jeho väčšine sezón vystihuje variabilitu denných priemerov koncentrácie ozónu v Európe presnejšie v simuláciách, ktoré boli vytvorené zo simulácií s UW schémou.

Porovnanie staničných a modelových sezónnych priemerov $PM_{2,5}$ ukázalo, že model má vo všetkých simuláciách tendenciu podhodnocovať sezónne koncentrácie v južnej Európe počas celého roka. Vo východnej i západnej Európe model predikuje vo všetkých simuláciách sezónne priemery spravidla tak, že ich nadhod-

notenie (podhodnotenie) nepresahuje dvojnásobok (polovicu) hodnoty staničných priemerov. Imisný limit $PM_{2,5}$ bol prekročený na 3 staniaciach (Věřňonice, Cornale a Buttigliera d'Asti) nebol, no na modelových staniaciach nebol prekročený ani v jednom prípade. Porovnaním hodnôt štatistických ukazovateľov bolo zistené, že model s výnimkou Pearsonovho korelačného koeficienta vo väčšine prípadov vystihuje ročnú i sezónnu variabilitu denných priemerov koncentrácie $PM_{2,5}$ v Európe presnejšie v simuláciách, ktoré boli vytvorené zo simulácií s UW schémou.

Validácia koncentrácií SO_2 poukázala, že model výrazne nadhodnocuje koncentrácie na staniaciach v západnej i vo východnej Európe, čo s najväčšou pravdepodobnosťou bude spôsobené nadhodnotením hodinových emisií vo vstupných dátach.

V snahe porovnať výsledky s meraniami spektrometra GOME-2, ktorý je umiestnený na družici Metop-A, boli vytvorené polia sezónnych stĺpcových koncentrácií. Porovania ukázali, že v zimnej sezóne sú modelové koncentrácie výraznejšie podhodnotené (zhruba dvojnásobne) v oblasti Pádskej nížiny; naopak výraznejšie nadhodnotené sú obzvlášť v oblasti Beneluxu a Porúria (i viac ako dvojnásobne), no taktiež v oblastiach južného Poľska či východného Anglicka. Obdobnú situáciu ako v sezóne zimnej je možné konštatovať aj vo zvyšných troch sezónach, kde však s výnimkou oblastí Beneluxu a Porúria nie sú evidentné až tak výrazné rozdiely.

Výsledky validácie staničných koncentrácií O_3 a $PM_{2,5}$ poukazujú na prínos spresnenia popisu turbulencie pomocou lokálnej schémy 1,5. rádu k zvýšeniu schopnosti prediktability modelového systému. Nutné je však dodať, že celkovú kvalitu simulácií ovplyvňuje mnoho faktorov, napr. horizontálne rozlíšenie, kvalita emisných vstupov do CHTM, čoho dôkazom sú s najväčšou pravdepodobnosťou nadhodnotené hodnoty pre oxid siričitý, neurčitosti plynúce zo spôsobu parametrizovania subgridových procesov v RCM, či z konštrukcie použitých chemických mechanizmov v CHTM, ako aj zo spôsobu prepojenia oboch modelov a i. Zvýšenie kvality sa preto nezaobíde bez ďalšieho testovania.

Tabuľková príloha

Označenie v CB05	Popis	Označenie v CB05	Popis
NO	Oxid dusnatý	MEO2	Metylperoxylový radikál
NO2	Oxid dusičitý	MEOH	Metanol
O3	Ozón	MEPX	Metylhydroperoxid
O	Atomárny kyslík v základnom stave (³ P)O	FACD	Kyselina mravčia
O1D	Atomárny kyslík v excitovanom stave (¹ D)O	ETHA	Etán
OH	Hydroxylový radikál	ROOH	Vyššie oranické peroxidy
HO2	Hydroperoxylový radikál	AACD	Kyselina octová a vyššie homológy
H2O2	Peroxid vodíka	PACD	Kyselina peroctová a vyššie homológy
NO3	Nitrátový radikál	PAR	Parafínová uhlíkova väzba
N2O5	Oxid dusičitý	ROR	Sekundárny alkoxylový radikál
HONO	Kyselina dusitá	ETH	Etén
HNO3	Kyselina dusičná	OLE	Terminálna olefinová väzba
PNA	Kyselina peroxydusitá	IOLE	Vnútoraná olefinová väzba
CO	Oxid uhoľnatý	ISOP	Izoprén
FORM	Formaldehyd	MGLY	Metylglyoxál a i. produkty z arénov
ALD2	Acetaldehyd	TERP	Terpén
C2O3	Peroxyacetylový radikál	TOL	Toluén a i. monoalkylové arény
PAN	Peroxyacetylnitrát	XYL	Xylén a i. polyalkylové arény
ALDX	Propanál a vyššie aldehydy	CRES	Krezol a i. fenoly
CXO3	Peroxypropylový radikál a vyššie homológy	OPEN	Produkty vznikajúce otvorením aromatického kruhu
PANX	Peroxypropylnitrát a vyššie homológy	TO2	Tolyhydroxylový radikál
XO2	Konverzia NO na NO ₂ z alkylperoxylových radikálov	CRO	Metylfenoxylový radikál
XO2N	Konverzia NO na organické nitráty z alkylperoxylových radikálov	ISPD	Produkty z izoprénu (metakroleín, metylvinylketón a i.)
NTR	Organické nitráty	SO2	Oxid siričitý
ETOH	Etanol	SULF	Kyselina sírová (plynná)
CH4	Metán		

Tabuľka 6.1: Prehľad chemických látok zabudovaných do chemického mechanizmu CB05 (Yarwood a kol., 2005).

Označenie v CB05	Reakcia	Označenie v CB05	Reakcia
R4	$O + NO_2 \longrightarrow NO$	R24	$NO + OH \longrightarrow HONO$
R5	$O + NO_2 \longrightarrow NO_3$	R25	$HONO + h\nu \longrightarrow NO + OH$
R6	$O + NO \longrightarrow NO_2$	R26	$OH + HONO \longrightarrow NO_2$
R10	$O1D \xrightarrow{M} O$	R27	$HONO + HONO \longrightarrow NO + NO_2$
R12	$O_3 + OH \longrightarrow HO_2$	R29	$OH + HNO_3 \longrightarrow NO_3$
R13	$O_3 + HO_2 \longrightarrow OH$	R32	$PNA + HO_2 \longrightarrow NO_2$
R15	$NO_3 + h\nu \longrightarrow NO$	R33	$PNA + OH \longrightarrow NO_2$
R17	$NO_3 + NO_2 \longrightarrow NO + NO_2$	R34	$HO_2 + HO_2 \longrightarrow H_2O_2$
R19	$N_2O_5 + H_2O \longrightarrow 2 HNO_3$	R35	$HO_2 + HO_2 + H_2O \longrightarrow H_2O_2$
R20	$N_2O_5 + 2 H_2O \longrightarrow 2 HNO_3$	R36	$H_2O_2 + h\nu \longrightarrow 2 OH$
R22	$NO + NO + O_2 \longrightarrow 2 NO_2$	R37	$H_2O_2 + OH \longrightarrow HO_2$
R23	$NO + NO_2 + H_2O \longrightarrow 2 HONO$	R38	$O1D + H_2 \longrightarrow OH + HO_2$

Tabuľka 6.2: Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do chemického mechanizmu CB05 (Yarwood a kol., 2005). V chemických reakciách je použité označenie chemických látok z tab. 6.1, pričom v reakciách sú uvedené len produkty, ktoré sú v mechanizme počítané.

Označenie v CB05	Reakcia	Označenie v CB05	Reakcia
R39	$\text{OH} + \text{H}_2 \longrightarrow \text{HO}_2$	R83	$\text{ALD}_2 + \text{O} \longrightarrow \text{C}_2\text{O}_3 + \text{OH}$
R40	$\text{OH} + \text{O} \longrightarrow \text{HO}_2$	R84	$\text{ALD}_2 + \text{OH} \longrightarrow \text{C}_2\text{O}_3$
R41	$\text{OH} + \text{OH} \longrightarrow \text{O}$	R85	$\text{ALD}_2 + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{C}_2\text{O}_3 + \text{HNO}_3$
R42	$\text{OH} + \text{OH} \longrightarrow \text{H}_2\text{O}_2$	R86	$\text{ALD}_2 + h\nu \longrightarrow \text{MEO}_2 + \text{CO} + \text{HO}_2$
R43	$\text{OH} + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{HO}_2 + \text{OH}$	R94	$\text{C}_2\text{O}_3 + \text{C}_2\text{O}_3 \longrightarrow 2 \text{MEO}_2$
R44	$\text{HO}_2 + \text{O} \longrightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	R95	$\text{PACD} + \text{OH} \longrightarrow \text{C}_2\text{O}_3$
R45	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} \longrightarrow \text{OH}$	R96	$\text{PACD} + h\nu \longrightarrow \text{MEO}_2 + \text{OH}$
R46	$\text{NO}_3 + \text{O} \longrightarrow \text{NO}_2$	R97	$\text{AACD}_2 + \text{OH} \longrightarrow \text{MEO}_2$
R47	$\text{NO}_3 + \text{OH} \longrightarrow \text{HO}_2 + \text{NO}_2$	R98	$\text{ALDX} + \text{O} \longrightarrow \text{CXO}_3 + \text{OH}$
R48	$\text{NO}_3 + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{HNO}_3$	R99	$\text{ALDX}_2 + \text{OH} \longrightarrow \text{CXO}_3$
R49	$\text{NO}_3 + \text{O}_3 \longrightarrow 2 \text{NO}_2$	R100	$\text{ALDX} + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{CXO}_3 + \text{HNO}_3$
R50	$\text{NO}_3 + \text{NO}_3 \longrightarrow 2 \text{NO}_2$	R101	$\text{ALDX} + h\nu \longrightarrow \text{MEO}_2 + \text{CO} + \text{HO}_2$
R52	$\text{HNO}_3 + h\nu \longrightarrow \text{OH} + \text{NO}_2$	R102	$\text{CXO}_3 + \text{NO} \longrightarrow \text{ALD}_2 + \text{NO}_2 + \text{HO}_2 + \text{XO}_2$
R55	$\text{XO}_2\text{N} + \text{NO} \longrightarrow \text{NTR}$	R106	$\text{PANX} + \text{OH} \longrightarrow \text{ALD}_2 + \text{NO}_2$
R56	$\text{XO}_2 + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{ROOH}$	R114	$\text{ROR} \longrightarrow \text{HO}_2$
R57	$\text{XO}_2\text{N} + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{ROOH}$	R115	$\text{ROR} + \text{NO}_2 \longrightarrow \text{NTR}$
R68	$\text{MEO}_2 + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{MEPX}$	R123	$\text{ETH} + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{NO}_2 + \text{XO}_2 + 2 \text{FORM}$
R71	$\text{MEPX} + h\nu \longrightarrow \text{FORM} + \text{HO}_2$	R130	$\text{TO}_2 \longrightarrow \text{CRES} + \text{HO}_2$
R72	$\text{MEOH} + \text{OH} \longrightarrow \text{FORM}$	R132	$\text{CRES} + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{CRO} + \text{HNO}_3$
R76	$\text{FORM} + \text{O} \longrightarrow \text{OH} + \text{HO}_2 + \text{CO}_2$	R133	$\text{CRO} + \text{NO}_2 \longrightarrow \text{NTR}$
R77	$\text{FORM} + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{HNO}_3 + \text{HO}_2 + \text{CO}$	R134	$\text{CRO} + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{CRES}$
R78	$\text{FORM} + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{HCO}_3$	R135	$\text{OPEN} + h\nu \longrightarrow \text{C}_2\text{O}_3 + \text{HO}_2 + \text{CO}$
R79	$\text{HCO}_3 + h\nu \longrightarrow \text{FORM} + \text{HO}_2$	139	$\text{MGLY} + \text{OH} \longrightarrow \text{XO}_2 + \text{C}_2\text{O}_3 + \text{HO}_2 + \text{CO}$
R81	$\text{HCO}_3 + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{MEPX}$	R140	$\text{MGLY} + h\nu \longrightarrow \text{C}_2\text{O}_3$
R82	$\text{FACD} + \text{OH} \longrightarrow \text{HO}_2$	R149	$\text{TERP} + \text{O} \longrightarrow 0,15 \text{ALDX} + 5,12 \text{PAR}$

Tabuľka 6.3: Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do chemického mechanizmu CB05 (Yarwood a kol., 2005) – pokračovanie tab.6.2.

Označenie v CB05	Reakcia
R51	$\text{PNA} + h\nu \longrightarrow 0,61 \text{HO}_2 + 0,61 \text{NO}_2 + 0,39 \text{OH} + 0,39 \text{NO}$
R61	$\text{NTR} + \text{OH} \longrightarrow \text{HNO}_3 + \text{HO}_2 + 0,33 \text{FORM} + 0,33 \text{ALD}_2 + 0,33 \text{ALDX} - 0,66 \text{PAR}$
R62	$\text{NTR} + h\nu \longrightarrow \text{NO}_2 + \text{HO}_2 + 0,33 \text{FORM} + 0,33 \text{ALD}_2 + 0,33 \text{ALDX} - 0,66 \text{PAR}$
R63	$\text{ROOH} + \text{OH} \longrightarrow \text{XO}_2 + 0,5 \text{ALD}_2 + 0,5 \text{ALDX}$
R64	$\text{ROOH} + h\nu \longrightarrow \text{OH} + \text{HO}_2 + 0,5 \text{ALD}_2 + 0,5 \text{ALDX}$
R69	$\text{MEO}_2 + \text{MEO}_2 \longrightarrow 1,37 \text{FORM} + 0,74 \text{HO}_2 + 0,63 \text{MEOH}$
R70	$\text{MEPX} + \text{OH} \longrightarrow 0,7 \text{MEO}_2 + 0,3 \text{XO}_2 + 0,3 \text{HO}_2$
R91	$\text{C}_2\text{O}_3 + \text{HO}_2 \longrightarrow 0,8 \text{PACD}_2 + 0,2 \text{AACD}_2 + 0,2 \text{O}_3$
R92	$\text{C}_2\text{O}_3 + \text{MEO}_2 \longrightarrow 0,9 \text{MEO}_2 + 0,9 \text{HO}_2 + \text{FORM} + 0,1 \text{AACD}$
R93	$\text{C}_2\text{O}_3 + \text{XO}_2 \longrightarrow 0,9 \text{MEO}_2 + 0,1 \text{AACD}$
R107	$\text{CXO}_3 + \text{HO}_2 \longrightarrow 0,8 \text{PACD} + 0,2 \text{AACD} + 0,2 \text{O}_3$
R108	$\text{CXO}_3 + \text{MEO}_2 \longrightarrow 0,9 \text{ALD}_2 + 0,9 \text{XO}_2 + \text{HO}_2 + 0,1 \text{AACD} + 0,1 \text{FORM}$
R109	$\text{CXO}_3 + \text{XO}_2 \longrightarrow 0,9 \text{ALD}_2 + 0,1 \text{AACD}$
R110	$\text{CXO}_3 + \text{CXO}_3 \longrightarrow 0,9 \text{ALD}_2 + 2 \text{XO}_2 + 2 \text{HO}_2$
R111	$\text{CXO}_3 + \text{C}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{MEO}_2 + \text{XO}_2 + \text{HO}_2 + \text{ALD}_2$
R112	$\text{PAR} + \text{OH} \longrightarrow 0,87 \text{XO}_2 + 0,13 \text{XO}_2\text{N} + 0,11 \text{HO}_2 + 0,06 \text{ALD}_2 - 0,11 \text{PAR} + 0,76 \text{ROR} + 0,05 \text{ALDX}$
R113	$\text{ROR} \longrightarrow 0,96 \text{XO}_2 + 0,6 \text{ALD}_2 + 0,94 \text{HO}_2 - 2,1 \text{PAR} + 0,04 \text{XO}_2\text{N} + 0,02 \text{ROR} + 0,5 \text{ALDX}$
R116	$\text{OLE} + \text{O} \longrightarrow 0,2 \text{ALD}_2 + 0,3 \text{ALDX} + 0,3 \text{HO}_2 + 0,2 \text{XO}_2 + 0,2 \text{CO} + 0,2 \text{FORM} + 0,01 \text{XO}_2\text{N} + 0,2 \text{PAR} + 0,1 \text{OH}$
R117	$\text{OLE} + \text{OH} \longrightarrow 0,8 \text{FORM} + 0,33 \text{ALD}_2 + 0,62 \text{ALDX} + 0,8 \text{XO}_2 + 0,95 \text{HO}_2 - 0,7 \text{PAR}$
R118	$\text{OLE} + \text{O}_3 \longrightarrow 0,18 \text{ALD}_2 + 0,74 \text{FORM} + 0,32 \text{ALDX} + 0,22 \text{XO}_2 + 0,1 \text{OH} + 0,33 \text{CO} + 0,44 \text{HO}_2 - \text{PAR}$
R119	$\text{OLE} + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{NO}_2 + \text{FORM} + 0,91 \text{XO}_2 + 0,09 \text{XO}_2\text{N} + 0,56 \text{ALDX} + 0,35 \text{ALD}_2 - \text{PAR}$
R120	$\text{ETH} + \text{O} \longrightarrow \text{FORM} + 1,7 \text{HO}_2 + \text{CO} + 0,7 \text{XO}_2 + 0,3 \text{OH}$
R121	$\text{ETH} + \text{OH} \longrightarrow \text{XO}_2 + 1,56 \text{FORM} + 0,22 \text{ALDX} + \text{HO}_2$
R122	$\text{ETH} + \text{O}_3 \longrightarrow \text{FORM} + 0,63 \text{CO} + 0,13 \text{HO}_2 + 0,13 \text{OH} + 0,37 \text{FACD}$
R124	$\text{IOLE} + \text{O} \longrightarrow 1,24 \text{ALD}_2 + 0,66 \text{ALDX} + 0,1 \text{HO}_2 + 0,1 \text{XO}_2 + 0,1 \text{CO} + 0,1 \text{PAR}$
R125	$\text{IOLE} + \text{OH} \longrightarrow 1,3 \text{ALD}_2 + 0,7 \text{ALDX} + \text{HO}_2 + \text{XO}_2$
R126	$\text{IOLE} + \text{O}_3 \longrightarrow 0,65 \text{ALD}_2 + 0,35 \text{ALDX} + 0,25 \text{FORM} + 0,25 \text{CO} + 0,5 \text{O} + 0,5 \text{OH} + 0,5 \text{HO}_2$
R127	$\text{IOLE} + \text{NO}_3 \longrightarrow 1,18 \text{ALD}_2 + 0,64 \text{ALDX} + \text{HO}_2 + \text{NO}_2$
R128	$\text{TOL} + \text{OH} \longrightarrow 0,44 \text{HO}_2 + 0,08 \text{XO}_2 + 0,36 \text{CRES} + 0,56 \text{TO}_2$
R129	$\text{TO}_2 + \text{NO} \longrightarrow 0,9 \text{NO}_2 + 0,9 \text{HO}_2 + 0,9 \text{OPEN} + 0,1 \text{NTR}$
R131	$\text{CRES} + \text{OH} \longrightarrow 0,4 \text{CRO} + 0,6 \text{XO}_2 + 0,6 \text{HO}_2 + 0,3 \text{OPEN}$
R137	$\text{OPEN} + \text{O}_3 \longrightarrow 0,03 \text{ALDX} + 0,62 \text{C}_2\text{O}_3 + 0,7 \text{FORM} + 0,03 \text{XO}_2 + 0,69 \text{CO} + 0,08 \text{OH} + 0,76 \text{HO}_2 + 0,2 \text{MGLY}$
R138	$\text{XYL} + \text{OH} \longrightarrow 0,7 \text{HO}_2 + 0,5 \text{XO}_2 + 0,2 \text{CRES} + 0,8 \text{MGLY} + 1,1 \text{PAR} + 0,3 \text{TO}_2$
R141	$\text{ISOP} + \text{O} \longrightarrow 0,75 \text{ISPD} + 0,5 \text{FORM} + 0,25 \text{XO}_2 + 0,25 \text{HO}_2 + 0,25 \text{CXO}_3 + 0,25 \text{PAR}$

Tabuľka 6.4: Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do chemického mechanizmu CB05 (Yarwood a kol., 2005) – pokračovanie tab.6.2.

Označenie v CB05	Reakcia
R142	ISOP + OH \longrightarrow 0,912 ISPD + 0,629 FORM + 0,991 XO2 + 0,912 HO2 + 0,088 XO2N
R143	ISOP + O ₃ \longrightarrow 0,65 ISPD + 0,6 FORM + 0,2 XO2 + 0,066 HO2 + 0,266 OH + + 0,2 CXO3 + 0,15 ALDX3 + 0,35 PAR + 0,066 CO
R144	ISOP + NO ₃ \longrightarrow 0,2 ISPD + 0,8 NTR + XO2 + 0,8 HO2 + 0,2 NO2 + + 0,8 ALDX + 2,4 PAR
R145	ISPD + OH \longrightarrow 1,565 PAR + 0,167 FORM + 0,713 XO2 + 0,503 HO2 + 0,334 CO + + 0,168 MGLY + 0,252 ALD2 + 0,21 C2O3 + 0,25 CXO3 + 0,12 ALDX
R146	ISPD + O ₃ \longrightarrow 0,114 C2O3 + 0,15 FORM + 0,85 MGLY + 0,154 HO2 + 0,268 OH + + 0,064 XO2 + 0,02 ALD2 + 0,36 PAR + 0,225 CO
R147	ISPD2 + NO ₃ \longrightarrow 0,357 ALDX + 0,282 FORM + 1,282 PAR + 0,925 HO2 + 0,643 CO + + 0,85 NTR + 0,075 CXO3 + 0,075 XO2 + 0,15 HNO3
R148	ISPD + hν \longrightarrow 0,333 CO + 0,067 ALD2 + 0,9 FORM + 0,832 PAR + 1,033 HO2 + + 0,7 XO2 + 0,4967 C2O3
R150	TERP + OH \longrightarrow 0,75 HO2 + 1,25 XO2 + 0,25 XO2N + 0,28 FORM + 1,66 PAR + 0,47 ALDX
R151	TERP + O ₃ \longrightarrow 0,57 OH + 0,07 HO2 + 0,76 XO2 + 0,18 HO2 + 0,2 NO2 + 0,8 ALDX + 2,4 PAR
R152	TERP + NO ₃ \longrightarrow 0,47 NO2 + 0,28 HO2 + 1,03 XO2 + 0,25 XO2N + 0,47 ALDX + 0,53 NTR
R154	ETOH + OH \longrightarrow HO2 + 0,9 ALD2 + 0,05 ALDX + 0,1 FORM + 0,1 XO2
R155	ETHA + OH \longrightarrow 0,991 ALD2 + 0,991 XO2 + 0,009 XO2N + HO2
R156	ISOP + NO ₂ \longrightarrow 0,2 ISPD + 0,8 NTR + XO2 + 0,8 HO2 + 0,2 NO2 + 0,8 ALDX + 2,4 PAR

Tabuľka 6.5: Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do chemického mechanizmu CB05 (Yarwood a kol., 2005) – pokračovanie tab.6.2.

Reakcia
$\text{HSO}_4^-(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{H}^+(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$
$\text{NH}_3(\text{g}) \rightleftharpoons \text{NH}_3(\text{aq})$
$\text{NH}_3(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{OH}^-(\text{aq})$
$\text{HNO}_3(\text{g}) \rightleftharpoons \text{H}^+(\text{aq}) + \text{NO}_3^-(\text{aq})$
$\text{HCl}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{H}^+(\text{aq}) + \text{Cl}^-(\text{aq})$
$\text{H}_2\text{O}(\text{aq}) \rightleftharpoons \text{H}^+(\text{aq}) + \text{OH}^-(\text{aq})$
$\text{Na}_2\text{SO}_4(\text{s}) \rightleftharpoons 2 \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4(\text{s}) \rightleftharpoons 2 \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$
$\text{NH}_4\text{Cl}(\text{s}) \rightleftharpoons 2 \text{NH}_3(\text{g}) + \text{HCl}(\text{g})$
$\text{NaNO}_3(\text{s}) \rightleftharpoons 2 \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{NO}_3^-(\text{aq})$
$\text{NaCl}(\text{s}) \rightleftharpoons 2 \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{Cl}^-(\text{aq})$
$\text{NaHSO}_4(\text{s}) \rightleftharpoons \text{Na}^+(\text{aq}) + \text{HSO}_4^-(\text{aq})$
$\text{NH}_4\text{NO}_3(\text{s}) \rightleftharpoons \text{NH}_3(\text{g}) + \text{HNO}_3(\text{g})$
$\text{NH}_4\text{HSO}_4(\text{s}) \rightleftharpoons \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{HSO}_4^-(\text{aq})$
$(\text{NH}_4)_3\text{H}(\text{SO}_4)_2(\text{s}) \rightleftharpoons 3 \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{HSO}_4^-(\text{aq}) + \text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$

Tabuľka 6.6: Prehľad chemických reakcií zabudovaných do chemického mechanizmu ISORROPIA (Nenes a kol., 1998). V zátvorkách sú za jednotlivými chemickými entitami v reakciách uvedené ich termodynamické fázy, pričom: s označuje tuhú fázu, g plynnú fázu a aq látku rozpustenú vo vodnom roztoku.

Hladina	σ	Hladina	σ	Hladina	σ	Hladina	σ	Hladina	σ	Hladina	σ
1	0	5	0,2	9	0,4	13	0,6	17	0,8	21	0,96
1,5	0,025	5,5	0,225	9,5	0,425	13,5	0,625	17,5	0,825	21,5	0,97
2	0,05	6	0,25	10	0,45	14	0,65	18	0,85	22	0,98
2,5	0,075	6,5	0,275	10,5	0,475	14,5	0,675	18,5	0,87	22,5	0,985
3	0,1	7	0,3	11	0,5	15	0,7	19	0,89	23	0,99
3,5	0,125	7,5	0,325	11,5	0,525	15,5	0,725	19,5	0,91	23,5	0,995
4	0,15	8	0,35	12	0,55	16	0,75	20	0,93	24	1
4,5	0,175	8,5	0,375	12,5	0,575	16,5	0,775	20,5	0,945		

Tabuľka 6.7: Vertikálna štruktúra použitá v simuláciách modelom RegCM 4.6.

Teplota	Str. syst. chyba [°C]					Odmocnina str. kvad. chyby [°C]					
	Model	rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
priemerná											
RegCM(PHA1)	-0,68	0,17	-1,20	-1,52	-0,12	2,39	2,63	2,38	2,46	2,08	
RegCM(PHA2)	0,02	0,68	-0,21	-0,74	0,38	2,24	2,64	2,04	2,20	2,07	
RegCM(PHA3)	-0,96	-0,41	-1,65	-1,59	-0,19	2,42	2,55	2,57	2,45	2,09	
RegCM(PHA4)	-0,18	-0,05	-0,62	-0,22	0,19	2,14	2,57	2,04	1,97	1,97	
maximálna											
RegCM(PHA1)	-2,07	-0,86	-2,81	-3,28	-1,32	3,63	3,00	4,05	4,40	3,05	
RegCM(PHA2)	-0,98	-0,17	-1,28	-1,95	-0,50	3,15	2,85	3,30	3,75	2,71	
RegCM(PHA3)	-2,28	-1,37	-3,15	-3,22	-1,37	3,66	3,07	4,25	4,26	3,04	
RegCM(PHA4)	-1,04	-0,86	-1,57	-1,11	-0,59	3,02	2,96	3,32	3,14	2,64	
minimálna											
RegCM(PHA1)	0,59	1,14	0,36	-0,04	0,90	2,73	3,45	2,56	2,20	2,72	
RegCM(PHA2)	1,09	1,62	1,01	0,45	1,28	2,88	3,49	2,77	2,29	2,98	
RegCM(PHA3)	0,16	0,51	-0,26	-0,32	0,74	2,64	3,22	2,43	2,21	2,72	
RegCM(PHA4)	0,72	0,81	0,46	0,63	1,04	2,74	3,33	2,52	2,29	2,85	

Tabuľka 6.8: Stredné systematické chyby a odmocniny strednej kvadratickej chyby priemernej dennej teploty vzduchu a denných maxím/miním teploty vzduchu v °C pre rok 2007 a pre jeho sezóny, určené medzi výsledkami zo simulácií RegCM(PHA1)–RegCM(PHA4) a z dát z E-OBS databázy (Cornes a kol., 2018) v regióne Európy. Oba typy chýb reprezentujú časové priemery plošne vážených priemerov chýb, ktoré boli stanovené vo vybranom regióne.

Teplota	Str. syst. chyba [°C]					Odmocnina str. kvad. chyby [°C]					
	Model	rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
priemerná											
RegCM(PHA1)	-0,24	0,15	-0,81	-1,20	0,93	2,14	2,59	2,18	2,03	2,46	
RegCM(PHA2)	0,43	0,56	0,34	-0,32	1,15	2,03	2,40	1,97	1,86	1,90	
RegCM(PHA3)	-0,73	-0,47	-1,56	-1,80	0,95	2,22	2,47	2,29	2,30	1,83	
RegCM(PHA4)	0,02	-0,35	-0,31	-0,16	0,90	1,97	2,56	1,82	1,59	1,93	
maximálna											
RegCM(PHA1)	-1,76	-0,89	-2,60	-3,30	-0,21	3,20	2,85	3,71	4,10	2,14	
RegCM(PHA2)	-0,73	-0,36	-0,88	-2,03	0,38	2,81	2,74	2,98	3,33	2,17	
RegCM(PHA3)	-2,19	-1,42	-3,28	-3,89	-0,15	3,42	2,96	3,98	4,47	2,25	
RegCM(PHA4)	-1,04	-1,29	-1,49	-1,69	0,31	2,83	3,08	3,01	2,96	2,26	
minimálna											
RegCM(PHA1)	1,08	0,94	1,03	0,63	1,71	2,61	3,20	2,50	2,03	2,71	
RegCM(PHA2)	1,55	1,36	1,82	1,30	1,71	2,70	2,87	2,84	2,27	2,81	
RegCM(PHA3)	0,45	0,24	0,07	-0,16	1,61	2,39	2,87	2,09	1,86	2,74	
RegCM(PHA4)	1,01	0,46	1,04	1,22	1,30	2,55	2,96	2,35	2,12	2,76	

Tabuľka 6.9: To isté ako v tab. 6.8, ale v regióne centrálnej Európy.

Teplota	Región: Európa					Región: centrálna Európa				
	Pearsonov korel. koeficient					Pearsonov korel. koeficient				
	Model	rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA
priemerná										
RegCM(PHA1)	0,88	0,89	0,86	0,88	0,89	0,70	0,71	0,69	0,71	0,69
RegCM(PHA2)	0,87	0,88	0,87	0,87	0,88	0,68	0,69	0,68	0,68	0,67
RegCM(PHA3)	0,89	0,90	0,87	0,89	0,88	0,71	0,73	0,70	0,73	0,68
RegCM(PHA4)	0,89	0,89	0,88	0,89	0,89	0,68	0,68	0,67	0,74	0,65
maximálna										
RegCM(PHA1)	0,85	0,89	0,81	0,83	0,87	0,61	0,65	0,61	0,57	0,60
RegCM(PHA2)	0,84	0,88	0,81	0,80	0,86	0,56	0,59	0,58	0,51	0,57
RegCM(PHA3)	0,85	0,89	0,82	0,84	0,86	0,62	0,65	0,63	0,59	0,60
RegCM(PHA4)	0,86	0,88	0,83	0,85	0,87	0,58	0,59	0,58	0,61	0,53
minimálna										
RegCM(PHA1)	0,82	0,84	0,80	0,83	0,82	0,57	0,61	0,51	0,59	0,56
RegCM(PHA2)	0,81	0,83	0,79	0,82	0,80	0,56	0,63	0,50	0,59	0,53
RegCM(PHA3)	0,83	0,84	0,81	0,83	0,82	0,58	0,65	0,55	0,60	0,54
RegCM(PHA4)	0,82	0,83	0,81	0,84	0,81	0,57	0,59	0,54	0,63	0,53

Tabuľka 6.10: Pearsonove korelačné koeficienty priemernej dennej teploty vzduchu a denných maxim/miním teploty vzduchu pre rok 2007 a pre jeho sezóny, určené medzi výsledkami zo simulácií RegCM(PHA1)–RegCM(PHA4) a z E-OBS databázy (Cornes a kol., 2018) v regióne Európy, resp. v regióne centrálnej Európy. Koeficienty reprezentujú časové priemery plošne vážených priemerov koeficientov, ktoré boli stanovené vo vybraných regiónoch.

Zrážky	Str. syst. chyba [mm]					Odmocnina str. kvad. chyby [mm]				
	Model	rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA
Európa										
RegCM(PHA1)	2,57	2,14	2,56	3,32	2,25	7,85	6,05	7,26	9,58	8,48
RegCM(PHA2)	2,40	1,70	2,50	3,40	2,00	7,85	5,62	7,21	10,05	8,47
RegCM(PHA3)	1,27	1,40	1,29	1,37	1,03	5,65	4,81	5,12	7,05	5,60
RegCM(PHA4)	1,60	1,31	1,67	2,10	1,30	6,32	4,86	5,80	8,03	6,57
Centrálna Európa										
RegCM(PHA1)	1,88	1,46	1,22	3,70	1,10	4,51	3,32	3,73	7,42	3,55
RegCM(PHA2)	1,42	1,24	0,86	3,19	0,37	4,38	3,09	3,31	7,47	3,62
RegCM(PHA3)	0,94	0,87	0,42	1,64	0,80	3,76	2,70	2,88	5,62	3,81
RegCM(PHA4)	1,19	0,92	0,69	2,53	0,63	3,95	2,65	3,24	6,53	3,36

Tabuľka 6.11: To isté ako v tab. 6.8, ale pre denný úhrn zrážok v mm v regióne Európy, resp. v regióne centrálnej Európy.

Zrážky	Región: Európa					Región: centrálna Európa				
	Pearsonov korel. koeficient					Pearsonov korel. koeficient				
	Model	rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA
RegCM(PHA1)	0,37	0,49	0,36	0,27	0,36	0,23	0,30	0,22	0,17	0,25
RegCM(PHA2)	0,34	0,45	0,34	0,25	0,32	0,20	0,28	0,22	0,10	0,21
RegCM(PHA3)	0,41	0,48	0,43	0,31	0,43	0,21	0,30	0,19	0,12	0,23
RegCM(PHA4)	0,39	0,46	0,41	0,31	0,38	0,23	0,31	0,22	0,13	0,29

Tabuľka 6.12: To isté ako v tab. 6.10, ale pre denný úhrn zrážok v regióne Európy, resp. v regióne centrálnej Európy.

Názov stanice	Štát	Geografické súradnice		Nadmorská výška [m n. m.]		Región Európy
		Z. d. [°]	Z. š. [°]	skutočná	modelová	
Kollumerwaard	Holandsko	6,28	53,33	1	0	západný
Zingst	Nemecko	12,72	54,44	1	2	východný
Preila	Litva	21,03	55,38	5	0	východný
Keldsnor	Dánsko	10,74	54,74	10	2	západný
Westerland	Nemecko	8,31	54,93	12	4	západný
Eibergen	Holandsko	6,57	52,08	20	31	západný
Vredepeel	Holandsko	5,85	51,54	28	18	západný
Neuglobsow	Nemecko	13,03	53,17	62	90	východný
Waldhof	Nemecko	10,76	52,80	74	43	západný
Topolníky	Slovensko	17,86	47,96	113	151	východný
Yarner Wood	Spojené kráľovstvo	-3,71	50,60	119	113	západný
La Tardière	Francúzsko	-0,75	46,65	133	131	západný
Niembro	Španielsko	-4,85	43,44	134	82	južný
Bush	Spojené kráľovstvo	-3,21	55,86	180	106	západný
Birkenes	Nórsko	8,25	58,38	190	16	západný
Peyrusse Vieille	Francúzsko	0,18	43,62	200	181	južný
Auchencorth Moss	Spojené kráľovstvo	-3,24	55,79	260	178	západný
High Muffles	Spojené kráľovstvo	-0,81	54,33	267	34	západný
Starina	Slovensko	22,27	49,05	345	607	východný
Revin	Francúzsko	4,63	49,90	390	259	západný
Barcarrota	Španielsko	-6,92	38,48	393	311	južný
Payerne	Švajčiarsko	6,94	46,81	489	654	západný
O Saviñao	Španielsko	-7,70	43,23	506	357	južný
Košetice	Česká republika	15,08	49,57	535	447	východný
Tänikon	Švajčiarsko	8,90	47,48	539	521	západný
Donon	Francúzsko	7,13	48,50	775	354	západný
Stará Lesná	Slovensko	20,28	49,15	808	696	východný
Montfranc	Francúzsko	2,07	45,80	810	662	západný
Montandon	Francúzsko	6,83	47,30	836	473	západný
Zarra	Španielsko	-1,10	39,09	885	591	južný
Hohenpeissenberg	Nemecko	11,01	47,80	985	621	západný
Rigi	Švajčiarsko	8,46	47,07	1031	822	západný
Churáňov	Česká republika	13,60	49,07	1118	545	východný
Chaumont	Švajčiarsko	6,98	47,05	1137	640	západný
Schauinsland	Nemecko	7,91	47,91	1205	590	západný
Víznar	Španielsko	-3,53	37,23	1265	1086	južný
Iraty	Francúzsko	-1,08	43,03	1300	417	južný
Puy de Dôme	Francúzsko	2,96	45,77	1465	483	západný
Krvavec	Slovensko	14,54	46,30	1740	785	východný
Le Casset	Francúzsko	6,47	45,00	1750	2002	západný
Chopok	Slovensko	19,58	48,93	2008	873	východný
Pic du Midi	Francúzsko	0,14	42,94	2877	605	južný

Tabuľka 6.13: Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií O₃. Pri každej stanici je uvedený jej názov, krajina, kde sa nachádza, geografické súradnice, 2 nadmorské výšky v metroch nad morom (m n. m.): prvá je skutočná (podľa ich vzrastajúcej hodnoty sú stanice v tabuľke zoradené), druhá je modelová (reprezentuje nadmorskú výšku sieťovej bunky v 1. modelovej vrstve, v ktorej stanica leží) a región Európy, do ktorého spadá. Zvýrazneným písmom sú označené stanice, ktoré boli použité pri tvorbe priemerných denných a ročných chodov a k výpočtu ďalších štatistických ukazovateľov než len sezónnych priemerov.

Názov stanice	Štát	Geografické súradnice		Nadmorská výška [m n. m.]		Región Európy
		Z. d. [°]	Z. š. [°]	skutočná	modelová	
Leba	Poľsko	17,53	54,75	2	23	východný
De Zilk*	Holandsko	4,50	52,30	4	0	západný
Vilsandi	Estónsko	21,82	58,38	6	8	východný
Vredepeel*	Holandsko	5,85	51,54	28	18	západný
Lahemaa	Estónsko	25,90	59,50	32	23	východný
Montelibretti	Taliansko	12,63	42,10	48	318	južný
Yarner Wood*	Spojené kráľovstvo	-3,71	50,60	119	113	západný
Lullington Heath*	Spojené kráľovstvo	0,18	50,79	120	24	západný
K-Puszta	Maďarsko	19,58	46,97	125	108	východný
La Tardière*	Francúzsko	-0,75	46,65	133	131	západný
Niembro*	Španielsko	-4,85	43,44	134	82	južný
Veziin*	Belgicko	4,99	50,50	160	173	západný
Jarczew	Poľsko	21,97	51,81	180	165	východný
Peyrusse Vieille*	Francúzsko	0,18	43,62	200	181	južný
High Muffles*	Spojené kráľovstvo	-0,81	54,33	267	34	západný
Eupen*	Belgicko	6,00	50,63	295	140	západný
Starina	Slovensko	22,27	49,05	345	607	východný
Aston Hill*	Spojené kráľovstvo	-3,03	52,50	370	133	západný
Offagme*	Belgicko	5,20	49,88	430	378	západný
Els Torms*	Španielsko	0,72	41,40	470	339	južný
O Saviñao*	Španielsko	-7,70	43,23	506	357	južný
Košetice*	Česká republika	15,08	49,57	535	447	východný
Tänikon	Švajčiarsko	8,91	47,48	539	521	západný
Hohenpeissenberg*	Nemecko	11,01	47,80	985	621	západný
Rigi	Švajčiarsko	8,46	47,07	1031	822	západný
Chaumont	Švajčiarsko	6,98	47,05	1137	640	západný
Víznar*	Španielsko	-3,53	37,23	1265	1086	južný
Sniezka	Poľsko	15,74	50,74	1603	454	východný
Chopok	Slovensko	19,58	48,93	2008	873	východný

Tabuľka 6.14: Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií NO₂. Popis tabuľky je uvedený v tab. 6.13. Hviezdičkou za názvom sú označené stanice, z ktorých boli dostupné priemerné hodinové koncentrácie, z ostatných boli dostupné priemerné denné koncentrácie.

Názov stanice	Štát	Geografické súradnice		Nadmorská výška [m n. m.]		Región Európy
		Z. d. [°]	Z. š. [°]	skutočná	modelová	
Leba	Poľsko	17,53	54,75	2	23	východný
Ulborg	Dánsko	8,43	56,29	10	22	západný
Rucava	Lotyšsko	21,17	56,16	18	32	východný
Anholt	Dánsko	11,52	56,72	40	2	západný
Montelibretti	Taliansko	12,63	42,10	48	318	
Neuglobsow	Nemecko	13,03	53,17	62	70	západný
Waldhof	Nemecko	10,76	52,80	74	43	západný
Illmitz*	Rakúsko	16,77	47,77	117	155	východný
Lullington Heath*	Spojené kráľovstvo	0,18	50,79	120	24	západný
K-Puszta	Maďarsko	19,58	46,97	125	108	východný
Niembro*	Španielsko	-4,85	43,44	134	82	južný

Tabuľka 6.15: Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií SO₂. Popis tabuľky je uvedený v tab. 6.13 a 6.14.

Názov stanice	Štát	Geografické súradnice		Nadmorská výška [m n. m.]		Región Európy
		Z. d. [°]	Z. š. [°]	skutočná	modelová	
Jarczew	Polsko	21,97	51,81	180	165	východný
Starina	Slovensko	22,27	49,05	345	607	východný
Payerne	Švajčiarsko	6,94	46,81	489	654	západný
Iskrba	Slovensko	14,87	45,57	520	541	východný
Košetice*	Česká republika	15,08	49,57	535	447	východný
Zarra*	Španielsko	-1,10	39,09	885	591	južný
Schmücke	Nemecko	10,77	50,65	937	408	západný
Penausende*	Španielsko	-5,87	41,28	985	750	južný
Vorhegg*	Rakúsko	12,97	46,68	1020	1291	východný
Rigi	Švajčiarsko	8,46	47,07	1031	822	západný
Schauinsland	Nemecko	7,91	47,91	1205	590	západný
Víznar*	Španielsko	-3,53	37,23	1265	1086	južný
Sniezka	Polsko	15,74	50,74	1603	454	východný
Chopok	Slovensko	19,58	48,93	2008	873	východný

Tabuľka 6.16: Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií SO₂ – pokračovanie tab.6.15.

Názov stanice	Štát	Geografické súradnice		Nadmorská výška [m n. m.]		Región Európy
		Z. d. [°]	Z. š. [°]	skutočná	modelová	
Houtem	Belgicko	2,58	51,02	2	6	západný
Lille*	Dánsko	12,12	55,69	10	13	východný
Rochester Stoke*	Spojené kráľovstvo	0,63	51,46	14	19	západný
Norr Malma*	Švédsko	18,63	59,83	20	5	východný
Cabo de Creus	Španielsko	3,32	42,32	23	20	južný
Ervedeira*	Portugalsko	-8,67	40,59	32	129	južný
Chamusca*	Portugalsko	-8,28	39,21	43	153	južný
Cornale	Taliansko	8,92	45,04	74	121	západný
Topolníky*	Slovensko	17,86	47,96	113	151	východný
Illmitz	Rakúsko	16,77	47,77	117	155	východný
Harwell*	Spojené kráľovstvo	-1,33	51,57	126	94	západný
Niembro	Španielsko	-4,85	43,44	134	82	južný
Doksany	Česká republika	14,17	50,46	158	322	východný
Věřňovice*	Česká republika	18,42	49,92	203	278	východný
Auchencorth Moss	Spojené kráľovstvo	-3,24	55,79	260	178	západný
Lom	Česká republika	13,67	50,59	265	369	východný
Buttigliera d'Asti	Taliansko	7,94	45,02	280	193	západný
Tušimice	Česká republika	13,33	50,38	322	466	východný
Barcarrota	Španielsko	-6,92	38,47	393	311	južný
Unterharz/Friedrichsbrunn*	Nemecko	11,04	51,66	410	212	západný
Els Torms	Španielsko	0,73	41,39	470	339	južný
Fundao*	Portugalsko	-7,18	40,14	473	659	južný
Payerne	Švajčiarsko	6,94	46,81	489	654	západný
O Saviñao	Španielsko	-7,70	42,63	506	357	južný
Ayia	Cyprus	33,06	35,04	532	355	južný
Pfälzerwald-Hortenkopf	Nemecko	7,83	49,27	606	254	západný
Zorita	Španielsko	-0,17	40,74	619	638	južný
Svratouch	Česká republika	16,03	49,74	735	390	východný
Minho-Lima	Portugalsko	-8,69	41,80	777	254	južný
Schwartenberg	Nemecko	13,47	50,66	785	322	západný
Zarra	Španielsko	-1,10	39,08	885	591	južný

Tabuľka 6.17: Prehľad staníc z databázy AirBase použitých pri validácii modelových koncentrácií PM_{2,5}. Popis tabuľky je uvedený v tab. 6.13 a 6.14.

Názov stanice	Štát	Geografické súradnice		Nadmorská výška [m n. m.]		Región Európy
		Z. d. [°]	Z. š. [°]	skutočná	modelová	
		Schwarzwald-Sud	Nemecko	7,76	47,81	
Penausende	Španielsko	-5,90	41,24	985	750	južný
Douro Norte	Portugalsko	-7,80	41,37	1086	635	južný
Víznar	Španielsko	-3,53	37,24	1230	1086	južný
Rojen	Bulharsko	24,74	41,69	1720	602	južný

Tabuľka 6.18: Prehľad staníc z databázy AirBase použitých pri validácii modelových koncentrácií PM_{2,5} – pokračovanie tab.6.17.

Koncentrácia O ₃		Región									
Štatistika	Model	Európa					Západná Európa				
		rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,64	0,54	0,50	0,58	0,63	0,65	0,59	0,53	0,58	0,63
	CAMx(PHA2)	0,64	0,52	0,55	0,54	0,57	0,64	0,57	0,57	0,54	0,56
	CAMx(PHA3)	0,66	0,57	0,56	0,60	0,63	0,68	0,64	0,59	0,61	0,62
	CAMx(PHA4)	0,64	0,53	0,54	0,57	0,57	0,65	0,58	0,56	0,57	0,54
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	-14	-10	-7	-18	-25	-16	-9	-6	-22	-29
	CAMx(PHA2)	-24	-23	-17	-23	-36	-26	-22	-7	-27	-40
	CAMx(PHA3)	-17	-11	-10	-20	-28	-18	-9	-10	-24	-32
	CAMx(PHA4)	-25	-24	-18	-24	-37	-27	-23	-19	-28	-41
Odmocnina str. kvad. chyby [μg.m ⁻³]											
	CAMx(PHA1)	22,65	19,72	23,66	24,65	22,24	22,66	19,14	22,97	25,39	22,62
	CAMx(PHA2)	25,45	22,16	24,76	27,23	27,24	25,80	21,64	24,53	28,35	27,98
	CAMx(PHA3)	22,68	19,17	19,16	25,36	23,31	22,70	18,25	21,86	26,11	23,75
	CAMx(PHA4)	25,84	22,30	25,59	27,33	27,73	26,16	21,67	25,47	28,26	28,58
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	0,14	0,16	0,10	0,13	0,19	0,15	0,16	0,10	0,14	0,22
	CAMx(PHA2)	0,16	0,18	0,10	0,15	0,25	0,17	0,18	0,10	0,17	0,30
	CAMx(PHA3)	0,14	0,15	0,09	0,13	0,20	0,15	0,14	0,09	0,15	0,24
	CAMx(PHA4)	0,16	0,18	0,11	0,15	0,26	0,18	0,18	0,11	0,17	0,31
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	0,86	0,95	0,83	0,73	0,87	0,88	0,93	0,84	0,78	0,90
	CAMx(PHA2)	0,77	0,82	0,65	0,68	0,77	0,79	0,83	0,69	0,74	0,78
	CAMx(PHA3)	0,86	0,94	0,75	0,75	0,86	0,89	0,94	0,78	0,81	0,90
	CAMx(PHA4)	0,77	0,81	0,64	0,69	0,75	0,80	0,82	0,68	0,75	0,78

Tabuľka 6.19: Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie O₃ v roku 2007 a v jeho sezónach, určené z porovnania meraní na vybraných EMEP staniách s výsledkami simulácií CAMx(PHA1) – CAMx(PHA4) v regióne Európy, resp. západnej Európy. Štatistické ukazovatele sú: Pearsonov korelačný koeficient, frakčná systematická chyba v percentách, odmocnina strednej kvadratickej chyby v μg.m⁻³, normovaná stredná kvadratická chyba a normovaná štandardná odchýlka. Hodnoty reprezentujú priemerné hodnoty zo všetkých staníc, ktoré spadajú do daného regiónu.

Koncentrácia O ₃		Región									
Štatistika	Model	Východná Európa					Južná Európa				
		rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,64	0,48	0,45	0,51	0,55	0,59	0,48	0,46	0,60	0,57
	CAMx(PHA2)	0,64	0,46	0,50	0,43	0,48	0,59	0,40	0,53	0,60	0,51
	CAMx(PHA3)	0,65	0,47	0,52	0,48	0,54	0,64	0,50	0,56	0,65	0,60
	CAMx(PHA4)	0,64	0,47	0,48	0,43	0,49	0,61	0,39	0,53	0,64	0,56
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	-8	5	-2	-14	-19	-17	-28	-13	-9	-20
	CAMx(PHA2)	-18	-16	-12	-17	-30	-24	-36	-20	-14	-28
	CAMx(PHA3)	-12	-1	-4	-16	-24	-19	-30	-16	-11	-22
	CAMx(PHA4)	-20	-16	-13	-19	-33	-24	-37	-21	-15	-27
Odmocnina str. kvad. chyby [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]											
	CAMx(PHA1)	22,14	17,90	23,97	25,41	20,57	23,23	23,72	25,84	20,27	22,70
	CAMx(PHA2)	23,64	18,36	22,89	27,49	24,89	26,20	27,85	27,65	21,77	27,07
	CAMx(PHA3)	22,21	17,50	21,55	26,82	22,07	23,20	24,09	25,41	19,86	23,05
	CAMx(PHA4)	24,42	18,57	23,56	28,49	25,98	26,23	28,24	28,30	21,41	26,37
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	0,13	0,16	0,10	0,11	0,16	0,12	0,18	0,11	0,08	0,12
	CAMx(PHA2)	0,13	0,14	0,08	0,12	0,21	0,14	0,23	0,12	0,09	0,16
	CAMx(PHA3)	0,12	0,14	0,08	0,12	0,18	0,12	0,18	0,10	0,08	0,13
	CAMx(PHA4)	0,14	0,14	0,09	0,13	0,22	0,14	0,24	0,12	0,09	0,15
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	0,94	0,99	0,94	0,64	0,95	0,62	0,62	0,59	0,60	0,61
	CAMx(PHA2)	0,79	0,79	0,64	0,54	0,85	0,57	0,48	0,49	0,63	0,54
	CAMx(PHA3)	0,89	0,92	0,81	0,60	0,92	0,61	0,60	0,51	0,64	0,57
	CAMx(PHA4)	0,79	0,81	0,63	0,53	0,81	0,57	0,45	0,49	0,64	0,51

Tabuľka 6.20: To isté ako v tab. 6.19, ale pre priemerné denné koncentrácie O₃ v regióne východnej, resp. južnej Európy.

Koncentrácia NO ₂		Región									
Štatistika	Model	Európa					Západná Európa				
		rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,36	0,32	0,33	0,45	0,48	0,27	0,20	0,28	0,31	0,32
	CAMx(PHA2)	0,36	0,30	0,35	0,48	0,44	0,27	0,17	0,31	0,35	0,29
	CAMx(PHA3)	0,37	0,32	0,34	0,46	0,48	0,27	0,19	0,29	0,33	0,31
	CAMx(PHA4)	0,36	0,29	0,36	0,49	0,45	0,27	0,17	0,32	0,36	0,29
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	29	23	15	61	30	15	16	-8	45	23
	CAMx(PHA2)	48	47	39	77	45	35	40	17	63	36
	CAMx(PHA3)	28	20	16	60	30	14	10	-8	43	23
	CAMx(PHA4)	48	44	39	77	47	34	33	23	63	39
Odmocnina str. kvad. chyby [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]											
	CAMx(PHA1)	9,43	10,68	8,47	7,29	9,58	11,39	13,19	10,30	8,46	12,07
	CAMx(PHA2)	9,26	10,85	7,39	7,40	9,90	10,90	13,20	7,97	8,36	12,35
	CAMx(PHA3)	9,42	10,86	8,40	7,27	9,65	11,43	13,52	10,16	8,44	12,28
	CAMx(PHA4)	9,24	11,07	7,42	7,34	9,81	10,88	13,50	7,76	8,31	12,22
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	1,06	1,06	1,08	1,10	0,78	0,86	1,05	0,91	0,78	0,62
	CAMx(PHA2)	1,25	1,40	1,05	1,36	0,98	0,96	1,35	0,70	0,93	0,75
	CAMx(PHA3)	1,05	1,07	1,07	1,08	0,80	0,85	1,04	0,89	0,76	0,65
	CAMx(PHA4)	1,24	1,41	1,05	1,34	0,98	0,95	1,31	0,71	0,92	0,75
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	1,18	0,95	1,48	0,99	1,21	1,39	1,06	1,98	1,32	1,49
	CAMx(PHA2)	1,00	0,81	1,10	0,80	1,10	1,20	0,92	1,45	1,04	1,38
	CAMx(PHA3)	1,19	1,00	1,47	1,02	1,22	1,41	1,11	1,96	1,36	1,51
	CAMx(PHA4)	1,01	0,86	1,12	0,79	1,07	1,21	1,00	1,38	1,03	1,34

Tabuľka 6.21: To isté ako v tab. 6.19, ale pre priemerné denné koncentrácie NO₂.

Koncentrácia NO ₂		Región									
Štatistika	Model	Východná Európa					Južná Európa				
		rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,16	0,34	0,14	0,42	0,44	0,53	0,62	0,64	0,65	0,60
	CAMx(PHA2)	0,16	0,37	0,05	0,33	0,40	0,52	0,62	0,67	0,62	0,59
	CAMx(PHA3)	0,19	0,36	0,13	0,45	0,47	0,52	0,58	0,66	0,66	0,64
	CAMx(PHA4)	0,17	0,34	0,04	0,39	0,41	0,53	0,58	0,63	0,64	0,61
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	44	21	59	87	35	59	46	49	94	61
	CAMx(PHA2)	65	44	83	100	53	79	71	68	104	81
	CAMx(PHA3)	48	25	60	87	39	58	46	51	94	56
	CAMx(PHA4)	67	48	82	100	58	77	72	69	102	76
Odmocnina str. kvad. chyby [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]											
	CAMx(PHA1)	7,42	8,24	7,21	4,99	5,74	6,90	7,69	4,88	7,21	6,60
	CAMx(PHA2)	7,47	8,19	7,71	5,37	6,03	7,51	8,76	5,34	7,58	7,43
	CAMx(PHA3)	7,29	8,06	7,24	4,98	5,68	6,91	7,96	4,87	7,17	6,26
	CAMx(PHA4)	7,44	8,30	7,77	5,32	6,09	7,46	8,92	5,47	7,49	7,17
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	1,47	1,03	1,63	1,56	0,79	1,11	0,81	0,81	2,08	0,87
	CAMx(PHA2)	1,86	1,29	2,46	2,14	1,05	1,64	1,39	1,19	2,56	1,38
	CAMx(PHA3)	1,46	1,03	1,66	1,57	0,80	1,10	0,87	0,83	2,01	0,74
	CAMx(PHA4)	1,90	1,38	2,46	2,09	1,13	1,59	1,46	1,27	2,43	1,21
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	0,84	0,84	0,54	0,45	0,96	0,60	0,60	0,60	0,35	0,65
	CAMx(PHA2)	0,69	0,72	0,41	0,40	0,81	0,45	0,44	0,48	0,31	0,47
	CAMx(PHA3)	0,80	0,80	0,53	0,44	0,94	0,64	0,66	0,61	0,36	0,68
	CAMx(PHA4)	0,66	0,67	0,45	0,40	0,78	0,46	0,46	0,47	0,32	0,50

Tabuľka 6.22: To isté ako v tab. 6.19, ale pre priemerné denné koncentrácie NO₂ v regióne východnej, resp. južnej Európy.

Koncentrácia SO ₂		Región									
Štatistika	Model	Európa					Západná Európa				
		rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,36	0,36	0,38	0,25	0,34	0,30	0,17	0,36	0,40	0,28
	CAMx(PHA2)	0,37	0,37	0,38	0,27	0,34	0,33	0,15	0,49	0,40	0,36
	CAMx(PHA3)	0,38	0,37	0,42	0,28	0,36	0,38	0,23	0,50	0,50	0,33
	CAMx(PHA4)	0,37	0,35	0,41	0,25	0,36	0,34	0,19	0,49	0,46	0,35
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	-84	-93	-82	-64	-82	-91	-102	-83	-79	-97
	CAMx(PHA2)	-73	-85	-65	-50	-75	-75	-89	-53	-60	-91
	CAMx(PHA3)	-82	-91	-77	-59	-85	-88	-99	-76	-76	-96
	CAMx(PHA4)	-72	-84	-65	-46	-77	-78	-94	-57	-58	-94
Odmocnina str. kvad. chyby [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]											
	CAMx(PHA1)	6,46	8,85	5,46	3,51	6,80	4,78	5,68	5,63	2,68	4,56
	CAMx(PHA2)	5,80	8,26	4,12	3,01	6,33	3,64	4,90	2,83	2,12	4,13
	CAMx(PHA3)	6,33	8,60	4,73	3,41	7,21	4,19	5,16	3,99	2,57	4,63
	CAMx(PHA4)	5,71	8,01	4,17	3,02	6,26	3,88	5,23	3,04	1,97	4,52
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	3,98	4,91	3,16	2,29	3,67	4,40	5,89	4,28	2,47	3,83
	CAMx(PHA2)	3,65	4,73	2,21	1,97	3,50	3,09	5,16	1,50	1,90	3,38
	CAMx(PHA3)	3,93	4,72	2,53	2,29	4,13	3,52	5,04	2,33	2,35	3,96
	CAMx(PHA4)	3,57	4,51	2,26	2,05	3,44	3,40	5,51	1,67	1,70	3,92
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	2,47	2,59	2,90	1,85	2,17	2,59	2,90	2,98	1,92	2,10
	CAMx(PHA2)	2,29	2,49	2,24	1,64	2,07	2,00	2,53	1,56	1,56	1,99
	CAMx(PHA3)	2,46	2,53	2,52	1,86	2,37	2,29	2,64	2,14	1,97	2,21
	CAMx(PHA4)	2,25	2,39	2,32	1,64	2,07	2,15	2,73	1,69	1,51	2,21

Tabuľka 6.23: To isté ako v tab. 6.19, ale pre priemerné denné koncentrácie SO₂.

Štatistika		Región									
		Východná Európa					Južná Európa				
Model		rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,42	0,41	0,46	0,14	0,41	0,43	0,47	0,36	0,59	0,35
	CAMx(PHA2)	0,42	0,42	0,41	0,20	0,39	0,42	0,47	0,30	0,50	0,32
	CAMx(PHA3)	0,44	0,43	0,45	0,17	0,43	0,40	0,44	0,38	0,53	0,32
	CAMx(PHA4)	0,42	0,41	0,41	0,17	0,42	0,39	0,43	0,39	0,41	0,32
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	-98	-106	-96	-78	-101	-6	-6	-21	1	7
	CAMx(PHA2)	-89	-99	-84	-66	-92	1	-2	-5	17	6
	CAMx(PHA3)	-97	-105	-93	-71	-101	-3	-3	-11	6	3
	CAMx(PHA4)	-87	-97	-76	-63	-90	1	1	-6	24	1
Odmocnina str. kvad. chyby [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]											
	CAMx(PHA1)	8,01	11,29	5,97	4,31	8,53	3,43	4,33	2,94	1,96	4,18
	CAMx(PHA2)	7,37	10,63	5,15	3,69	7,90	3,41	4,37	2,53	2,12	4,30
	CAMx(PHA3)	8,00	11,07	5,65	4,18	9,11	3,56	4,46	2,58	2,07	4,52
	CAMx(PHA4)	7,12	10,11	5,01	3,73	7,62	3,62	4,53	2,54	2,26	4,44
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	4,30	4,93	3,06	2,75	3,90	1,34	1,46	1,33	0,60	1,72
	CAMx(PHA2)	4,09	4,78	2,64	2,31	3,77	1,42	1,55	1,15	0,83	1,83
	CAMx(PHA3)	4,39	4,78	2,87	2,78	4,45	1,49	1,60	1,13	0,70	1,95
	CAMx(PHA4)	3,92	4,49	2,73	2,43	3,61	1,59	1,71	1,15	1,01	1,83
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	2,98	3,14	3,17	2,21	2,64	0,91	0,72	1,55	1,04	0,83
	CAMx(PHA2)	2,85	3,06	2,84	1,97	2,55	0,88	0,77	1,22	0,97	0,85
	CAMx(PHA3)	3,04	3,09	3,02	2,24	2,93	0,93	0,74	1,35	1,03	0,96
	CAMx(PHA4)	2,77	2,90	2,89	2,00	2,51	0,95	0,75	1,35	0,91	0,93

Tabuľka 6.24: To isté ako v tab. 6.19, ale pre priemerné denné koncentrácie SO₂ v regióne východnej, resp. južnej Európy.

Štatistika		Región									
		Európa					Západná Európa				
Model		rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,42	0,51	0,44	0,29	0,37	0,39	0,50	0,43	0,34	0,34
	CAMx(PHA2)	0,43	0,53	0,44	0,25	0,35	0,42	0,51	0,45	0,30	0,34
	CAMx(PHA3)	0,40	0,51	0,45	0,32	0,34	0,39	0,50	0,48	0,43	0,33
	CAMx(PHA4)	0,40	0,47	0,44	0,28	0,33	0,36	0,41	0,46	0,33	0,33
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	30	52	9	41	27	22	64	-1	17	11
	CAMx(PHA2)	50	65	37	68	41	38	69	25	45	19
	CAMx(PHA3)	24	51	3	23	24	14	59	-9	-3	8
	CAMx(PHA4)	44	62	31	49	40	32	71	19	23	17
Odmocnina str. kvad. chyby [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]											
	CAMx(PHA1)	12,17	15,61	10,51	8,88	12,87	13,34	18,99	11,56	7,15	13,27
	CAMx(PHA2)	12,35	15,86	10,09	9,40	13,31	13,04	19,20	10,02	6,55	13,38
	CAMx(PHA3)	12,25	15,49	10,66	9,02	13,23	13,53	18,84	11,81	7,79	13,89
	CAMx(PHA4)	12,37	16,25	10,00	9,08	13,28	13,37	20,10	10,01	6,87	13,29
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	1,07	1,56	0,69	0,97	1,05	1,15	1,98	0,73	0,68	0,97
	CAMx(PHA2)	1,36	1,85	0,84	1,45	1,30	1,30	2,14	0,72	0,76	1,07
	CAMx(PHA3)	1,02	1,52	0,66	0,84	1,07	1,09	1,84	0,71	0,66	1,03
	CAMx(PHA4)	1,28	1,88	0,78	1,11	1,27	1,28	2,38	0,68	0,67	1,04
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	0,75	0,61	1,03	0,76	0,68	0,79	0,53	1,21	1,47	0,79
	CAMx(PHA2)	0,60	0,48	0,74	0,52	0,61	0,68	0,50	0,88	0,97	0,78
	CAMx(PHA3)	0,78	0,59	1,08	0,98	0,72	0,86	0,56	1,32	1,80	0,88
	CAMx(PHA4)	0,62	0,52	0,77	0,72	0,59	0,69	0,46	0,93	1,34	0,76

Tabuľka 6.25: To isté ako v tab. 6.19, ale pre priemerné denné koncentrácie PM_{2,5}. Ukazovatele boli určené z porovnania staničných meraní z databázy AirBase s výsledkami simulácií CAMx(PHA1) – CAMx(PHA4).

Koncentrácia PM _{2,5}		Región									
		Východná Európa					Južná Európa				
Štatistika	Model	rok	DJF	MAM	JJA	SON	rok	DJF	MAM	JJA	SON
Pearsonov korel. koeficient											
	CAMx(PHA1)	0,41	0,49	0,45	0,28	0,38	0,37	0,35	0,38	0,39	0,27
	CAMx(PHA2)	0,42	0,54	0,44	0,25	0,36	0,32	0,31	0,37	0,29	0,18
	CAMx(PHA3)	0,39	0,46	0,48	0,29	0,33	0,36	0,39	0,35	0,35	0,33
	CAMx(PHA4)	0,41	0,47	0,47	0,29	0,35	0,32	0,37	0,31	0,27	0,24
Frakčná syst. chyba											
	CAMx(PHA1)	33	46	9	43	39	39	41	25	63	34
	CAMx(PHA2)	55	65	38	72	55	62	57	52	86	58
	CAMx(PHA3)	30	47	9	26	39	31	42	12	51	27
	CAMx(PHA4)	49	55	36	49	59	56	58	42	79	49
Odmocnina str. kvad. chyby [$\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$]											
	CAMx(PHA1)	14,88	18,08	10,46	12,34	17,37	7,74	7,78	9,37	6,92	6,94
	CAMx(PHA2)	15,42	18,45	10,89	13,36	18,09	8,22	8,02	9,48	7,88	7,58
	CAMx(PHA3)	14,87	18,15	9,97	12,33	17,89	7,75	7,39	9,95	6,77	6,52
	CAMx(PHA4)	15,22	18,55	10,57	12,52	18,33	8,02	7,80	9,52	7,66	7,11
Norm. str. kvad. chyba											
	CAMx(PHA1)	1,06	1,24	0,49	1,28	1,28	0,75	0,83	0,90	0,80	0,55
	CAMx(PHA2)	1,45	1,58	0,72	2,05	1,64	1,09	1,05	1,22	1,36	0,84
	CAMx(PHA3)	1,04	1,26	0,45	1,06	1,36	0,69	0,76	0,89	0,67	0,45
	CAMx(PHA4)	1,32	1,43	0,66	1,39	1,76	0,96	1,01	1,10	1,18	0,67
Norm. štand. odchýlka											
	CAMx(PHA1)	0,65	0,69	0,89	0,49	0,52	0,88	0,83	0,85	0,77	1,03
	CAMx(PHA2)	0,48	0,45	0,66	0,37	0,40	0,61	0,61	0,57	0,46	0,74
	CAMx(PHA3)	0,63	0,60	0,83	0,69	0,53	0,96	0,74	0,98	0,95	1,05
	CAMx(PHA4)	0,53	0,59	0,67	0,51	0,37	0,64	0,56	0,62	0,52	0,79

Tabuľka 6.26: To isté ako v tab. 6.19, ale pre priemerné denné koncentrácie PM_{2,5} v regióne východnej, resp. južnej Európy. Ukazovatele boli určené z porovnania staničných meraní z databázy AirBase s výsledkami simulácií CAMx(PHA1) – CAMx(PHA4).

Zoznam použitej literatúry

- ACOSTA NAVARRO, J. C., SMOLANDER, S., STRUTHERS, H., ZORITA, E., EKMAN, A. M., KAPLAN, J. O., GUENTHER, A., ARNETH, A. a RIIPINEN, I. (2014). Global emissions of terpenoid VOCs from terrestrial vegetation in the last millennium. *J. Geophys. Res. Atmos.*, **119**(11), 6867–6885. doi: 10.1002/2013JD021238.
- ANTHES, R. A. A. (1977). A cumulus parameterization scheme utilizing a one-dimensional cloud model. *Monthly Weather Review*, **105**.
- ARAKAWA, A. a SCHUBERT, W. H. (1974). Interaction of a Cumulus Cloud Ensemble with the Large-Scale Environment, Part I. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **31**.
- ATMOSPHERIC AND ENVIRONMENTAL RESEARCH. URL http://rtweb.aer.com/rrtm_frame.html.
- BAEDE, A. P. M., AHLONSOU, E., DING, Y. a SCHIMEL, D. (2019). The Climate System: an Overview. URL <https://www.ipcc.ch/site/assets/uploads/2018/03/TAR-01.pdf>.
- BAŤKA, M. (2014). Předpověď vývoje atmosféry objektivními metodami. URL <https://docplayer.cz/10745667-Predpoved-vyvoje-atmosfery-objektivnimi-metodami.html>.
- BERRISFORD, P., DEE, D., POLI, P., BRUGGE, R., FIELDING, M., FUENTES, M., KÅLLBERG, P., KOBAYASHI, S., UPPALA, S. a SIMMONS, A. (2011). *The ERA-Interim Archive*. European Centre for Medium Range Weather Forecasts, Shinfield Park, Reading, Berkshire RG2 9AX, United Kingdom. ERA Report Series No.1 Version 2.0.
- BLUNDEN, J., ARNDT, D. S. a EDS. (2019). State of the Climate in 2018. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **100**(9). doi: 10.1175/2019BAMSStateoftheClimate.1.Si-S305.
- BOERSMA, K. F., ESKES, H. J. a BRINKSMA, E. J. (2004). Error Analysis for Tropospheric NO₂ Retrieval from Space. *J. Geophys. Res.*, **109**. doi: 10.1029/2003JD003962.
- BORREGO, C., MONTEIRO, A., FERREIRA, J., MIRANDA, A. I., COSTA, A. M., CARVALHO, A. C. a LOPES, M. (2008). Procedures for estimation of modelling uncertainty in air quality assessment. *Environment International*, **34**.
- BOY, M., MOGENSEN, D., SMOLANDER, S., ZHOU, L., NIEMINEN, T. a PASONEN, P. (2013). Oxidation of SO₂ by stabilized Criegee intermediate (sCI) radicals as a crucial source for atmospheric sulfuric acid concentrations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **13**(7), 3865–3879. doi: 10.5194/acp-13-3865-2013. URL <http://pure.iiasa.ac.at/id/eprint/10314/>.

- BYUN, D. W. a CHING, J. K. S. (1999). *Science Algorithms of the EPA Model-3 Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Modeling System*. United States Environmental Protection Agency, Office of Research and Development Washington, DC 20460. EPA600/R-99/030.
- CARTER, W. P. L. (1999). Documentation of the SAPRC-99 Mechanism for VOC Reactivity Assessment. *Draft final report on California Air Resources Board Contracts No. 92-329 and 95-308*.
- CARTER, W. P. L. (2010). Development of the SAPRC-07 Chemical Mechanism and Updated Ozone Reactivity Scales. Report to the California Air Resources Board Contracts No. 03-318, 06-408, and 07-730. URL <https://intra.engr.ucr.edu/~carter/SAPRC/saprc07.pdf>.
- CHANG, J. C. a HANNA, S. R. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **87**.
- COLELLA, P. a WOODWARD, P. R. (1984). The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations. *Journal of Computational Physics*, **54**.
- CORNES, R., VAN DER SCHRIER, G., VAN DEN BESSELAAR, E. J. M. a JONES, P. D. (2018). An Ensemble Version of the E-OBS Temperature and Precipitation Datasets. *J. Geophys. Res. Atmos.*, **123**. doi: 10.1029/2017JD028200.
- DE SALES, F. a XUE, Y. (2006). Investigation of seasonal prediction of the South American regional climate using the nested model system. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, **111**(D20). doi: 10.1029/2005JD006989.
- DICKINSON, R. E., HENDERSON-SELLERS, A. a KENNEDY, P. J. (1993). Biosphere-Atmosphere Transfer Scheme(BATS) Version 1e as Coupled to the NCAR Community Climate Model. *NCAR Technical Note, NCAR/TN-387+STR*. doi: 10.5065/D6RR1W7M.
- ELGUINDI, N., BI, X., GIORGI, F., NAGARAJAN, B., PAL, J., SOLMON, F., RAUSCHER, S., ZAKEY, A., O'BRIEN, T., NOGHEROTTO, R. a GIULIANI, G. (2014). Regional Climate Model RegCM Reference Manual Version 4.6. URL <https://gforge.ictp.it/gf/project/regcm/docman/?subdir=5>.
- EMANUEL, K. A. a ZIVKOVIC-ROTHMAN, M. (1999). Development and evaluation of a convection scheme for use in climate models. *J. Atmos. Sci.*, **56**.
- EMERY, C., TAI, E., YARWOOD, G. a MORRIS, R. (2011). Investigation into approaches to reduce excessive vertical transport over complex terrain in a regional photochemical grid model. *Atmospheric Environment*, **45**.
- EMMONS, L. K., WALTERS, S., HESS, P. G., LAMARQUE, J.-F., PFISTER, G. G., FILLMORE, D., GRANIER, C., GUENTHER, A., KINNISON, D., LAEPPEL, T., ORLANDO, J., TIE, X., TYNDALL, G., WIEDINMYER, C., BAUGHUM, S. L. a KLOSTER, S. (2010). Description and evaluation of the Model for Ozone and Related chemical Tracers, version 4 (MOZART-4). *Geosci. Model Dev.*, **3**. URL <https://www.geosci-model-dev.net/3/43/2010/>.

- FRITSCH, J. M. a CHAPPELL, C. F. (1980). Numerical Prediction of Convectivity Driven Mesoscale Pressure Systems. Part I: Convective Parametrization. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **37**.
- GARCIA, L., CORREA, S., PENTEADO, R., DAEMME, L., GATTI, L. a ALVIM, D. (2013). Measurements of emissions from motorcycles and modeling its impact on air quality. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, **24**, 375–384. doi: 10.1590/S0103-50532013000300003.
- GEIGER, R., ARON, R. H. a TODHUNTER, P. (1995). *The Climate Near the Ground*. Vieweg+Teubner Verlag. doi: 10.1007/978-3-322-86582-3.
- GIORGI, F., MARINUCCI, M. R. a BATES, G. T. (1993). Development of a Second-Generation Regional Climate Model (RegCM2). Part I: Boundary-Layer and Radiative Transfer Processes. *Monthly Weather Review*, **121**(10).
- GIORGI, F., COPPOLA, E., SOLMON, F., MARIOTTI, L., SYLLA, M. B., BI, X., ELGUINDI, N., DIRO, T. A., GIULIANI, G., TURUNCOGLU, U. U., COZZINI, S., GÜTTLER, I., O'BRIEN, T. A., TAWFIK, A. B., SHALABY, A., ZAKKEY, A. S., STEINER, A. L., STORDAL, F., SLOAN, L. C. a BRANKOVIC, C. (2012). RegCM4: model description and preliminary tests over multiple CORDEX domains. *Climate Research*, **52**.
- GIORGI, F., SOLMON, F. a GIULIANI, G. (2016). Regional Climatic Model RegCM User's Guide Version 4.6. URL <https://gforge.ictp.it/gf/project/regcm/docman/?subdir=5>.
- GRELL, G. (1993). Prognostic evaluation of assumptions used by cumulus parameterizations. *Monthly Weather Review*, **121**.
- GRELL, G. A., DUDHIA, J. a STAUFFER, D. R. (1994). A description of the fifth-generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (mm5). *NCAR Scientific Tech Note*, **NCAR/TN-398+STR**, 138pp. doi: 10.5065/D60Z716B.
- GRENIER, H. a BRETHERTOHN, C. S. (2001). A Moist PBL Parameterization for Large-Scale Models and Its Application to Subtropical Cloud-Topped Marine Boundary Layers. *Monthly Weather Review*, **129**.
- GUENTHER, A. B., JIANG, X., HEALD, C. L., SAKULYANONTVITTAYA, T., DUHL, T., EMMONS, L. K., a WANG, X. (2012). The Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature version 2.1 (MEGAN2.1): an extended and updated framework for modeling biogenic emissions. *Geosci. Model Dev.*, **5**. URL <https://doi.org/10.5194/gmd-5-1471-2012>.
- GÜTTLER, I., BRANKOVIĆ, Č., O'BRIEN, T. A., COPPOLA, E., GRISOGONO, B. a GIORGI, F. (2014). Sensitivity of the regional climate model RegCM4.2 to planetary boundary layer parameterisation. *Climate Dynamics*, **43**. doi: 10.1007/s00382-013-2003-6.
- HERTEL, O., BERKOWICZ, R., CHRISTENSEN, J. a HOV, O. (1993). TEST OF TWO NUMERICAL SCHEMES FOR USE IN ATMOSPHERIC TRANSPORT-CHEMISTRY MODELS. *Atmospheric Environment*, **27A**.

- HOLTSLAG, A. A. M., DE BRUIJN, E. I. F. a PAN, H.-L. (1990). A High Resolution Air Mass Transformation Model for Short-Range Weather Forecasting. *Monthly Weather Review*, **118**.
- HUANG, X., RHOADES, A. M., ULLRICH, P. A. a ZARZYCKI, C. M. (2016). An evaluation of the variable-resolution CESM for modeling California's climate. *J. Adv. Model. Earth Syst.*, **8**. doi: 10.1002/2015MS000559.
- HUSZAR, P., MIKSOVSKY, J., PISOFT, P., BELDA, M. a HALENKA, T. (2012). Interactive coupling of a regional climate model and a chemistry transport model: Evaluation and preliminary results on ozone and aerosol feedback. *Clim. Res.*, **51**. doi: 10.3354/cr01054.
- HUSZAR, P., BELDA, M. a HALENKA, T. (2016a). On the long-term impact of emissions from central European cities on regional air quality. *Atmos. Chem. Phys.*, **16**. doi: 10.5194/acp-16-1331-2016.
- HUSZAR, P., BELDA, M., KARLICKÝ, J., PIŠOFT, P. a HALENKA, T. (2016b). The regional impact of urban emissions on climate over central Europe: Present and future emission perspectives. *Atmos. Chem. Phys.*, **16**. doi: 10.5194/acp-16-12993-2016.
- HUSZAR, P., KARLICKÝ, J., BELDA, M., HALENKA, T. a PIŠOFT, P. (2018a). The impact of urban canopy meteorological forcing on summer photochemistry. *Atmos. Environ.*, **176**. URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.12.037>.
- HUSZAR, P., BELDA, M., KARLICKÝ, J., BARDACHOVA, T., HALENKA, T. a PISOFT, P. (2018b). Impact of urban canopy meteorological forcing on aerosol concentrations. *Atmos. Chem. Phys.*, **18**. URL <https://doi.org/10.5194/acp-18-14059-2018>.
- HUSZAR, P., KARLICKÝ, J., ĎOUBALOVÁ, J., ŠINDELÁŘOVÁ, K., NOVÁKOVÁ, T., BELDA, M., HALENKA, T., ŽÁK, M. a PIŠOFT, P. (2020). Urban canopy meteorological forcing and its impact on ozone and PM2.5: role of vertical turbulent transport. *Atmos. Chem. Phys.*, **20**. URL <https://doi.org/10.5194/acp-20-1977-2020>.
- HUSZÁR, P. (2011). *Coupling atmospheric chemistry/aerosols to regional climate models*. PhD thesis, Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta. URL https://is.cuni.cz/webapps/zzp/detail/42361/44271686/?q=%7B%22_____searchform___search%22%3A%22Coupling+atmospheric+chemistry%5C%2Faerosols+to+regional+climate+models%22%2C%22_____searchform___butsearch%22%3A%22Vyhledat%22%2C%22PNzzpSearchListbasic%22%3A1%7D&lang=cs.
- IPCC (2013). *Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA. [Stocker, T. F., Qin, D., Plattner, G.-K., Tignor, M., Allen, S. K., Boschung, J., Nauels, A., Xia, Y., Bex, V. a Midgley, P. M. (editori)].

- JACOBSON, M. Z. (2002). *Atmospheric Pollution: History, Science, and Regulation*. Cambridge University Press. doi: 10.1017/CBO9780511802287.
- JACOBSON, M. Z. (2005). *Fundamentals of Atmospheric Modeling, Second Edition*. Cambridge University Press.
- KAIN, J. S. (2004). The Kain–Fritsch Convective Parameterization: An Update. *Journal of Applied Meteorology*, **43**.
- KIEHL, J. T., HACK, J. J., BONAN, G. B., BOVILLE, B. A., BRIEGLEB, B. P., WILLIAMSON, D. L. a RASCH, P. J. (1996). Description of the NCAR Community Climate Model (CCM3). Technical Report 420, National Center for Atmospheric Research.
- LAPRISE, R. (2008). Regional climate modelling. *Journal of Computational Physics*, **227**(7), 3641 – 3666. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.10.024>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999106005407>.
- MACC-III FINAL REPORT (2016). Monitoring Atmospheric Composition and Climate 3. URL https://atmosphere.copernicus.eu/sites/default/files/repository/MACCIII_FinalReport.pdf.
- NATIONAL RESEARCH COUNCIL (1991). *Rethinking the Ozone Problem in Urban and Regional Air Pollution*. The National Academies Press, Washington, DC. ISBN 978-0-309-04631-2. doi: 10.17226/1889.
- NENES, A., PILINIS, C. a PANDIS, S. N. (1998). ISORROPIA: A New Thermodynamic Model for Multiphase Multicomponent Inorganic Aerosols. *Aquatic Geochemistry*, **4**.
- NOGHEROTTO, R., TOMPKINS, A. M., GIULIANI, G., COPPOLA, E. a GIORGI, F. (2016). Numerical framework and performance of the new multiple-phase cloud microphysics scheme in RegCM4.5: precipitation, cloud microphysics, and cloud radiative effects. *Geosci. Model Dev.*, **9**. doi: 10.5194/gmd-9-2533-2016.
- OLESON, K., LAWRENCE, D. M., BONAN, G. B., DREWNIAK, B., HUANG, M., KOVEN, C. D., LEVIS, S., LI, F., RILEY, W. J., SUBIN, Z. M., SWENSON, S., THORNTON, P. E., BOZBIYIK, A., FISHER, R., HEALD, C. L., KLUZEK, E., LAMARQUE, J.-F., LAWRENCE, P. J., LEUNG, L. R., LIPSCOMB, W., MUSZALA, S. P., RICCIUTO, D. M., SACKS, W. J., SUN, Y., TANG, J. a YANG, Z.-L. (2013). Technical description of version 4.5 of the Community Land Model (CLM). *NCAR Technical Note, No. NCAR/TN-503+STR*. doi: 10.5065/D6RR1W7M.
- OLESON, K. W., NIU, G.-Y., YANG, Z.-L., LAWRENCE, D. M., THORNTON, P. E., LAWRENCE, P. J., STÖCKLI, R., DICKINSON, R. E., BONAN, G. B., LEVIS, S., DAI, A. a QIAN, T. (2008). Improvements to the Community Land Model and their impact on the hydrological cycle. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, **113**(G1). doi: 10.1029/2007JG000563.

- PAL, J. S., SMALL, E. E. a ELTAHIR, E. A. B. (2000). Simulation of regional-scale water and energy budgets: Representation of subgrid cloud and precipitation processes within RegCM. *J. Geophys. Res.-Atmospheres*, **105**(D24).
- PECHALA, F. a BEDNÁŘ, J. (1991). *Průručka dynamické meteorologie*. Academia.
- QIAN, Y., HENNEMAN, L. R. F., MULHOLLAND, J. A. a RUSSELL, A. G. (2019). Empirical Development of Ozone Isopleths: Applications to Los Angeles. *Environmental Science & Technology Letters*, **6**(5), 294–299. doi: 10.1021/acs.estlett.9b00160.
- RAMBOLL ENVIRONMENT AND HEALTH (2018). Comprehensive air quality model with extensions version 6.50 user's guide. URL http://www.camx.com/files/camxusersguide_v6-50.pdf.
- RANDALL, D. A., BITZ, C. M., DANABASOGLU, G., DENNING, A. S., GENT, P. R., GETTELMAN, A., GRIFFIES, S. M., LYNCH, P., MORRISON, H., PINCUS, R. a THUBURN, J. (2018). 100 Years of Earth System Model Development. *Meteorological Monographs*, **59**. doi: 10.1175/AMSMONOGRAPHS-D-18-0018.1. URL <https://doi.org/10.1175/AMSMONOGRAPHS-D-18-0018.1>.
- SCHULZWEIDA, U. (2019). CDO User Guide. URL <https://code.mpimet.mpg.de/projects/cdo/embedded/cdo.pdf>.
- SEIGNEUR, C. (2019). *Air Pollution: Concepts, Theory, and Applications*. Cambridge University Press. doi: 10.1017/9781108674614.
- SEINFELD, J. H. a PANDIS, S. N. (1998). *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. John Wiley & Sons, Inc., First edition. ISBN 0-471-17815-2.
- SHALABY, A., ZAKAY, A. S., TAWFIK, A. B., SOLMON, F., GIORGI, F., STORDAL, F., SILLMAN, S., ZAVERI, R. A. a STEINER, A. L. (2012). Implementation and evaluation of online gas-phase chemistry within a regional climate model (RegCM-CHEM4). *Geosci. Model Dev.*, **5**.
- SINDELAROVA, K., GRANIER, C., I. BOUARAR, I., GUENTHER, A., TILMES, S., STAVRAKOU, T., MÜLLER, J.-F., KUHN, U., STEFANI, P. a KNORR, W. (2014). Global data set of biogenic VOC emissions calculated by the MEGAN model over the last 30 years. *Atmos. Chem. Phys.*, **14**, 9317–9341. doi: 10.5194/acp-14-9317-2014.
- STRADER, R., LURMANN, F. a PANDIS, S. N. (1999). Evaluation of Secondary Organic Aerosol Formation in Winter. *Atmospheric Environment*, **33**.
- TIEDTKE, M. (1989). A Comprehensive Mass Flux Scheme of Cumulus Parameterization in Large-Scale Models. *Monthly Weather Review*, **117**.
- WAGNER, A., HEINZELLER, D., WAGNER, S., RUMMLER, T. a KUNSTMANN, H. (2018). Explicit Convection and Scale-Aware Cumulus Parameterizations:

- High-Resolution Simulations over Areas of Different Topography in Germany. *Monthly Weather Review*, **146**. doi: 10.1175/MWR-D-17-0238.1.
- WILKS, D. S. (2006). *Statistical Methods in the Atmospheric Sciences, Second Edition*. Academic Press. ISBN 0127519661.
- XUE, Y., JANJIC, Z., DUDHIA, J., VASIC, R. a DE SALES, F. (2014). A review on regional dynamical downscaling in intraseasonal to seasonal simulation/prediction and major factors that affect downscaling ability. *Atmospheric Research*, **147-148**, 68 – 85. doi: <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2014.05.001>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169809514002002>.
- YARWOOD, G., RAO, S., YOCKE, M. a WHITTEN, G. Z. (2005). Updates to the Carbon Bond chemical mechanism: CB05. URL http://www.camx.com/publ/pdfs/CB05_Final_Report_120805.pdf. Závěrečná správa pre US EPA.
- ZENG, X., ZHAO, M. a DICKINSON, R. E. (1998). Intercomparison of Bulk Aerodynamic Algorithms for the Computation of Sea Surface Fluxes Using TOGA COARE and TAO Data. *Journal of Climate*, **11**.
- ZHANG, L., GONG, S., PADRO, J. a BARRIE, L. (2001). A size-segregated particle dry deposition scheme for an atmospheric aerosol module. *Atmospheric Environment*, **35**.
- ZHANG, L., BROOK, J. R. a VET, R. (2003). A revised parameterization for gaseous dry deposition in air-quality models. *Atmos. Chem. Phys.*, **3**.
- ČESKÁ METEOROLOGICKÁ SPOLEČNOST (2019). Elektronický meteorologický slovník výkladový a terminologický (eMS). URL <http://slovník.cmes.cz>.

Zoznam obrázkov

1	Schéma klimatického systému	10
1.1	Schéma všeobecnej cirkulácie atmosféry	15
1.2	Schémy vertikálneho teplotného profilu v medznej vrstve atmosféry	16
1.3	Závislosť účinných prierezov a kvantových výťažkov vybraných fo- tolytických reakcií od vlnovej dĺžky žiarenia	18
1.4	Závislosť rýchlostných konštánt vybraných reakcií od teploty . . .	20
1.5	Schéma fotochemickej oxidácie ROL	27
1.6	Izoplety maximálnej koncentrácie O_3 v závislosti od počiatočných koncentrácií, resp. od veľkostí denných emisií NO_x a ROL	29
1.7	Ilustračné príklady tvaru objemovej distribúcie a distribúcie počtu aerosólových častíc v závislosti od ich priemeru v typicky znečis- tenej urbanizovanej oblasti	31
1.8	Ilustrácia radiačného pôsobenia (RP) a efektívneho radiačného pô- sobenia (ERP) rôznych druhov aerosólov v období 1750–2011. . .	32
2.1	Ilustrácia vplyvu vlny tepla na koncentráciu prízemného ozónu. .	41
3.1	Ilustrácia spresnenia poľa prúdenia a mernej vlhkosti vzduchu po- mocou RCM	46
3.2	Porovnanie poľa oblačnosti simulovaného pomocou GCM a RCM .	48
3.3	Ilustrácia zmien poľa ročného úhrnu zrážok simulovaného RCM so zvyšujúcim sa horizontálnym rozlíšením	48
3.4	Ilustrácia horizontálnej štruktúry siete vo VRGCM	50
3.5	Schéma horizontálnej roviny a vertikálnej štruktúry v RegCM 4.6	55
3.6	Schéma hierarchie modelu CLM 4.5	59
3.7	ECMWF schéma mikrofyziky stratiformnej oblačnosti zabudovaná do RegCM 4.6.	60
3.8	Ilustrácia vertikálnych profilov rozdielu sezónnych priemerov ko- eficientu turbulentej difúzie pre teplo, K_H , vo vybraných regiónoch	62
3.9	Ilustrácia Grellovej schémy konvekcie	66
4.1	Schéma sieťovej bunky v CAMx6.50	68
4.2	Ilustrácia závislosti príspevkov mechanizmov suchej depozície k jej celkovej rýchlosti od priemeru aerosólových častíc	72
4.3	Ilustrácia závislosti koeficientu mokrého vymývania aerosólových častíc dažďovými kvapkami od priemeru aerosólových častíc a od intenzity zrážok	73
5.1	Oblasť realizácie simulácií modelom RegCM 4.6	84
5.2	Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vzduchu a rozdielov priemerných denných maxim/miním teploty vzduchu v zimnej se- zónne 2007	98
5.3	Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vzduchu a rozdielov priemerných denných maxim/miním teploty vzduchu v letnej se- zónne 2007	99

5.4	Polia rozdielu priemerných denných úhrnov zrážok v roku 2007 a v jeho zimnej/letnej sezóne	100
5.5	Polia rozdielu priemerných sezónnych výšok MVA a priemerných denných maxim/miním výšky MVA v zimnej sezóne 2007	110
5.6	Polia rozdielu priemerných sezónnych výšok MVA a priemerných denných maxim/miním výšky MVA v letnej sezóne 2007	111
5.7	Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych teplôt vzduchu nad regiónmi Európy v zime/lete 2007	112
5.8	Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vduchu, priemerných denných úhrnov zrážok a priemerných sezónnych rýchlostí horizontálneho vetra v zimnej sezóne 2007	113
5.9	Polia rozdielu priemerných sezónnych teplôt vduchu, priemerných denných úhrnov zrážok a priemerných sezónnych rýchlostí horizontálneho vetra v letnej sezóne 2007	114
5.10	Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych merných vlhkostí vzduchu nad regiónmi Európy v zime/lete 2007	115
5.11	Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych veľkostí rýchlosti horizontálneho vetra nad regiónmi Európy v zime/lete 2007	116
6.1	Polia priemernej sezónnej koncentrácie O_3 v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	131
6.2	Vertikálne profily priemernej sezónnej koncentrácie O_3 , NO_2 , SO_2 a $PM_{2,5}$ v zime/lete 2007 nad regiónmi Európy určené zo simulácie CAMx(PHA1)	132
6.3	Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií O_3 nad regiónmi Európy v zime/lete 2007	133
6.4	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií O_3 v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	134
6.5	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií O_3 v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	134
6.6	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií O_3 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007	135
6.7	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií O_3 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	136
6.8	Polia priemernej sezónnej koncentrácie NO_2 v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	137
6.9	Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií NO_2 nad regiónmi Európy v zime/lete 2007	138
6.10	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií NO_2 v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	139
6.11	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií NO_2 v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	139
6.12	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií NO_2 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007	140
6.13	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií NO_2 v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	141
6.14	Polia priemernej sezónnej koncentrácie SO_2 v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	142

6.15	Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií SO ₂ nad regiónmi Európy v zime/lete 2007	143
6.16	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií SO ₂ v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	144
6.17	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií SO ₂ v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	144
6.18	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií SO ₂ v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007	145
6.19	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií SO ₂ v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	146
6.20	Polia priemernej sezónnej koncentrácie PM _{2,5} v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	147
6.21	Vertikálne profily rozdielov priemerných sezónnych koncentrácií PM _{2,5} nad regiónmi Európy v zime/lete 2007	148
6.22	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií PM _{2,5} v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007	149
6.23	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií PM _{2,5} v 1. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	149
6.24	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií PM _{2,5} v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007	150
6.25	Polia rozdielu priemerných sezónnych koncentrácií PM _{2,5} v 3., 5., 7. a 9. modelovej vrstve v zime/lete 2007 – pokračovanie	151
6.26	Rozptylové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie O ₃ v jednotlivých sezónach roka 2007	164
6.27	Priemerné denné (ročné) chody priemernej sezónnej (mesačnej) koncentrácie O ₃ na vybraných EMEP stanicích a ich ekvivalenty určené z najnižšej modelovej vrstvy simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)	165
6.28	Polia počtu dní v roku 2007 s prekročeným imisným limitom koncentrácie O ₃ v najnižšej modelovej vrstve	166
6.29	Rozptylové diagramy počtu dní v roku 2007 s prekročeným imisným limitom koncentrácie O ₃	167
6.30	Rozptylové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie NO ₂ v jednotlivých sezónach roka 2007	168
6.31	Priemerné denné (ročné) chody priemernej sezónnej (mesačnej) koncentrácie NO ₂ na vybraných EMEP stanicích a ich ekvivalenty určené z najnižšej modelovej vrstvy simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)	169
6.32	Polia priemerných sezónnych stĺpcových koncentrácií troposférického NO ₂	170
6.33	Rozptylové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie SO ₂ v jednotlivých sezónach roka 2007	171
6.34	Priemerné denné (ročné) chody priemernej sezónnej (mesačnej) koncentrácie SO ₂ na vybraných EMEP stanicích a ich ekvivalenty určené z najnižšej modelovej vrstvy simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)	172
6.35	Rozptylové diagramy pre namerané a modelové priemerné sezónne koncentrácie PM _{2,5} v jednotlivých sezónach roka 2007	173

6.36	Priemerné denné (ročné) chody priemernej sezónnej (mesačnej) koncentrácie $PM_{2,5}$ na vybraných staniach z databázy AirBase a ich ekvivalenty určené z najnižšej modelovej vrstvy simulácií CAMx (PHA1) – CAMx (PHA4)	174
6.37	Polia priemernej ročnej koncentrácie $PM_{2,5}$ v najnižšej modelovej vrstve v roku 2007	175

Zoznam tabuliek

1	Chemické zloženie čistej a suchej atmosféry	7
1.1	Koncentrácie vybraných plynov v čistej a v znečistenej troposfére	14
1.2	Životnosť vybraných ROL v znečistenom mestskom ovzduší na úrovni hladiny mora.	24
1.3	Prírastkové reaktivity vybraných reaktívnych organických látok (ROL).	28
1.4	Prehľad vlastností najzastúpenejších druhov aerosólov v troposfére	33
1.5	Prehľad vlastností najzastúpenejších druhov aerosólov v troposfére – pokračovanie	34
2.1	Vybrané charakteristiky základných tlakových útvarov v troposfére	38
3.1	Prehľad niektorých parametrizácií zabudovaných v RegCM 4.6 . .	57
5.1	Nastavenie parametrizácií v simuláciách modelom RegCM 4.6 . . .	83
5.2	Geografické vymedzenie regiónov	87
6.1	Prehľad chemických látok zabudovaných do chemického mechanizmu CB05	179
6.2	Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do CB05 . .	179
6.3	Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do CB05 – pokračovanie	180
6.4	Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do CB05 – pokračovanie	180
6.5	Prehľad vybraných chemických reakcií zabudovaných do CB05 – pokračovanie	181
6.6	Prehľad chemických reakcií zabudovaných do chemického mechanizmu ISORROPIA	181
6.7	Vertikálna štruktúra použitá v simuláciách modelom RegCM 4.6 .	181
6.8	Stredné systematické chyby a <i>RMSE</i> priemernej dennej teploty vzduchu a denných maxim/miním teploty vzduchu v regióne Európy.	182
6.9	Stredné systematické chyby a <i>RMSE</i> priemernej dennej teploty vzduchu a denných maxim/miním teploty vzduchu v regióne centrálnej Európy.	182
6.10	Pearsonove korelačné koeficienty priemernej dennej teploty vzduchu a denných maxim/miním teploty vzduchu v regióne Európy, resp. v regióne centrálnej Európy.	183
6.11	Stredné systematické chyby a <i>RMSE</i> denného úhrnu zrážok v regióne Európy, resp. v regióne centrálnej Európy.	183
6.12	Pearsonove korelačné koeficienty denného úhrnu zrážok v regióne Európy, resp. v regióne centrálnej Európy.	183
6.13	Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií O ₃	184
6.14	Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií NO ₂	185

6.15	Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií SO ₂	185
6.16	Prehľad EMEP staníc použitých pri validácii modelových koncentrácií SO ₂ – pokračovanie	186
6.17	Prehľad staníc z databázy AirBase použitých pri validácii modelových koncentrácií PM _{2,5}	186
6.18	Prehľad staníc z databázy AirBase použitých pri validácii modelových koncentrácií PM _{2,5} – pokračovanie	187
6.19	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie O ₃ v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne Európy, resp. západnej Európy.	187
6.20	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie O ₃ v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne východnej, resp. južnej Európy.	188
6.21	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie NO ₂ v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne Európy, resp. západnej Európy.	188
6.22	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie NO ₂ v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne východnej, resp. južnej Európy.	189
6.23	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie SO ₂ v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne Európy, resp. západnej Európy.	189
6.24	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie SO ₂ v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne východnej, resp. južnej Európy.	190
6.25	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie PM _{2,5} v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne Európy, resp. západnej Európy.	190
6.26	Vybrané štatistické ukazovatele pre priemerné denné koncentrácie PM _{2,5} v roku 2007 a v jeho sezónach v regióne východnej, resp. južnej Európy.	191