

# Užití moderních ICT při řešení problémů environmentálních distribučních modelů

Jaroslav Urbánek

*Masarykova univerzita, RECETOX,*

*Kamenice 126/3, 625 00 Brno*

*e-mail: [urbanek@iba.muni.cz](mailto:urbanek@iba.muni.cz)*

## Abstrakt

Při předpovídání výskytu a vývoje polutantů v životním prostředí se užívají tzv. environmentální distribuční modely. Tyto modely simulují pohyb sledovaných látek mezi jednotlivými složkami prostředí. Matematickým popisem dějů uvnitř modelu dospějeme zpravidla k soustavě rovnic, které je třeba vyřešit. Článek se zabývá speciální třídou distribučních modelů, tzv. box modely, které simulují výskyt a vývoj látek označovaných jako POPs (persistentní organické polutanty). Matematickým popisem takového modelu je soustava šestnácti obyčejných diferenciálních rovnic, která je řešena analyticky i numericky za pomoci matematických systémů Maple, Matlab a R-project.

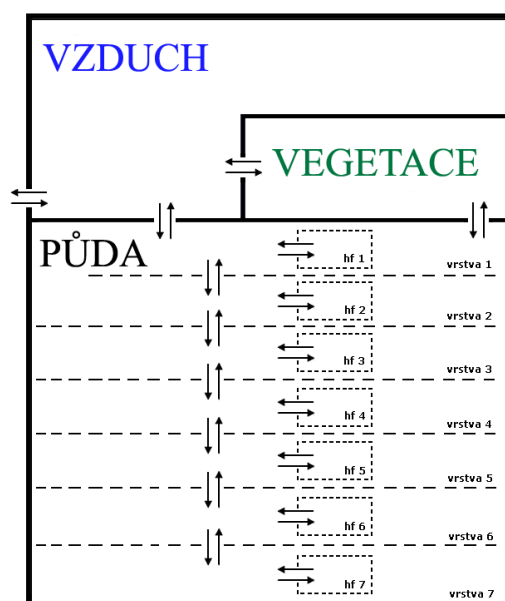
## 1. Úvod

Box model (neboli boxový model) je idealizovaný prostor používaný k výpočtu distribuce polutantů v životním prostředí. Je rozdělen na jednotlivé kompartmenty (typicky vzduch, vegetace, voda, půda, sediment), které mají rozměry a objemy odpovídající reálnému prostředí. Tyto kompartmenty mohou být dále rozděleny na jednotlivé vrstvy k zajištění lepšího popisu distribuce. Základním předpokladem modelu je, že uvnitř jednotlivých vrstev je homogenní struktura nacházející se v termodynamické rovnováze.

## 2. Matematický popis modelu

Zjednodušené schéma modelu poskytuje obrázek 1. Obsahuje tři kompartmenty (vzduch, vegetace, půda), přičemž půdní kompartment je dále rozdělen na sedm vrstev, z nichž každá má dvě složky: „základní“ a „hlubokou“ (tzv. hlubokou frakci – hf). Šipky znázorňují jednotlivé transportní procesy. Jednotlivým kompartmentům přiřadíme čísla: 1 ... vzduch, 2 ... vegetace, 3-9 ... půda.

Tradičním přístupem k popisu stavu polutantů v box modelech je využití koncentrace. Jiným je pak použití tzv. fugacity. Koncept fugacity byl zaveden již v roce 1901 a jeho vhodnost pro řešení environmentálních rovnováh vyšla najevo v posledních desetiletích, jelikož se pomocí fugacity podařilo snadno vyjádřit rychlosti přenosů hmoty přes fázové rozhraní. Fugacita se dá definovat jako „tendence k úniku“, jednotku má stejnou jako tlak, tedy pascal. Také její význam má charakter parciálního tlaku sloučeniny v dané fázi. Fugacita je přitom lineárně závislá na koncentraci, mírou závislosti je veličina zvaná fugacitní kapacita. Pro uvedenou výhodu fugacity ji budeme používat i v našem případě ([2], [3]).



Obrázek 1: Schéma modelu

Princip řešení modelu spočívá v napsání hmotnostních bilančních rovnic pro každou fázi obsahující jako neznámé veličiny zmíněné fugacity ( $(f_1 - f_{9d})$ ). Všechny prvky rovnic (koeficienty a neznámé) jsou indexovány. Indexy 1, ..., 9, 3d, ...9d odpovídají jednotlivým fázím (viz očíslování kompartmentů), přičemž indexy obsahující písmeno  $d$  značí hlubokou frakci (půdy). Symbol veličiny mající jeden z předchozích indexů pak vyjadřuje velikost této veličiny v příslušné fázi. Kromě fugacit se v rovnicích setkáme s objemem fáze ( $V$ ), fugacitní kapacitou fáze ( $Z$ ) a tzv.  $D$ -koeficienty reprezentujícími transportní procesy v modelu. Jejich indexy vyjadřují směr transportního procesu (tj. „odkud kam“).

Ze získaných fugacit a příslušných fugacitních kapacit pak bývají dále vypočítány molární koncentrace pro jednotlivé složky modelu a ty jsou následně převedeny na hmotnostní koncentrace v příslušných řádech.

V našem případě již budeme znát hodnoty všech  $D$ -koeficientů, objemů fází a fugacitních kapacit. Dříve, než se pustíme do hledání řešení, zdůrazněme, že nepředpokládáme existenci transportních procesů mezi modelem a okolím s výjimkou vytékávání z nejspodnější půdní vrstvy. Dále nepředpokládáme žádnou produkci (či jiný vznik) sledovaných látek. Počáteční hodnoty fugacit jsou reálné hodnoty naměřené v jednom konkrétním okamžiku (a mění se pouze v důsledku transportních procesů v modelu).

Zapsáním a úpravou hmotnostních bilančních rovnic obdržíme následující systém lineárních diferenciálních rovnic.

$$f_1' = - \frac{(D_{12}+D_{13}+D_{adv}+D_{r1})}{V_1 \cdot Z_1} \cdot f_1 + \frac{D_{21}}{V_1 \cdot Z_1} \cdot f_2 + \frac{D_{31}}{V_1 \cdot Z_1} \cdot f_3$$

$$f_2' = \frac{D_{12}}{V_2 \cdot Z_2} \cdot f_1 - \frac{(D_{21}+D_{23}+D_{r2})}{V_2 \cdot Z_2} \cdot f_2 + \frac{D_{32}}{V_2 \cdot Z_2} \cdot f_3$$

$$f_3' = \frac{D_{13}}{V_3 \cdot Z_3} \cdot f_1 + \frac{D_{23}}{V_3 \cdot Z_3} \cdot f_2 - \frac{(D_{31}+D_{32}+D_{r3}+D_{td3})}{V_3 \cdot Z_3} \cdot f_3 + \frac{D_{43}}{V_3 \cdot Z_3} \cdot f_4 + \frac{D_{fd3}}{V_3 \cdot Z_3} \cdot f_{3d}$$

$$f_4' = \frac{D_{34}}{V_4 \cdot Z_4} \cdot f_3 - \frac{(D_{43}+D_{45}+D_{r4}+D_{td4})}{V_4 \cdot Z_4} \cdot f_4 + \frac{D_{54}}{V_4 \cdot Z_4} \cdot f_5 + \frac{D_{fd4}}{V_4 \cdot Z_4} \cdot f_{4d}$$

$$\begin{aligned}
f'_5 &= \frac{D_{45}}{V_5 \cdot Z_5} \cdot f_4 - \frac{(D_{54} + D_{56} + D_{r5} + D_{td5})}{V_5 \cdot Z_5} \cdot f_5 + \frac{D_{65}}{V_5 \cdot Z_5} \cdot f_6 + \frac{D_{fd5}}{V_5 \cdot Z_5} \cdot f_{5d} \\
f'_6 &= \frac{D_{56}}{V_6 \cdot Z_6} \cdot f_5 - \frac{(D_{65} + D_{67} + D_{r6} + D_{td6})}{V_6 \cdot Z_6} \cdot f_6 + \frac{D_{76}}{V_6 \cdot Z_6} \cdot f_7 + \frac{D_{fd6}}{V_6 \cdot Z_6} \cdot f_{6d} \\
f'_7 &= \frac{D_{67}}{V_7 \cdot Z_7} \cdot f_6 - \frac{(D_{76} + D_{78} + D_{r7} + D_{td7})}{V_7 \cdot Z_7} \cdot f_7 + \frac{D_{87}}{V_7 \cdot Z_7} \cdot f_8 + \frac{D_{fd7}}{V_7 \cdot Z_7} \cdot f_{7d} \\
f'_8 &= \frac{D_{78}}{V_8 \cdot Z_8} \cdot f_7 - \frac{(D_{87} + D_{89} + D_{r8} + D_{td8})}{V_8 \cdot Z_8} \cdot f_8 + \frac{D_{98}}{V_8 \cdot Z_8} \cdot f_9 + \frac{D_{fd8}}{V_8 \cdot Z_8} \cdot f_{8d} \\
f'_9 &= \frac{D_{89}}{V_9 \cdot Z_9} \cdot f_8 - \frac{(D_{98} + D_{9x} + D_{r9})}{V_9 \cdot Z_9} \cdot f_9 + \frac{D_{fd9}}{V_9 \cdot Z_9} \cdot f_{9d} \\
f'_{3d} &= \frac{D_{td3}}{V_{3d} \cdot Z_{3d}} \cdot f_3 - \frac{(D_{fd3} + D_{rd3})}{V_{3d} \cdot Z_{3d}} \cdot f_{3d} \\
f'_{4d} &= \frac{D_{td4}}{V_{4d} \cdot Z_{4d}} \cdot f_4 - \frac{(D_{fd4} + D_{rd4})}{V_{4d} \cdot Z_{4d}} \cdot f_{4d} \\
f'_{5d} &= \frac{D_{td5}}{V_{5d} \cdot Z_{5d}} \cdot f_5 - \frac{(D_{fd5} + D_{rd5})}{V_{5d} \cdot Z_{5d}} \cdot f_{5d} \\
f'_{6d} &= \frac{D_{td6}}{V_{6d} \cdot Z_{6d}} \cdot f_6 - \frac{(D_{fd6} + D_{rd6})}{V_{6d} \cdot Z_{6d}} \cdot f_{6d} \\
f'_{7d} &= \frac{D_{td7}}{V_{7d} \cdot Z_{7d}} \cdot f_7 - \frac{(D_{fd7} + D_{rd7})}{V_{7d} \cdot Z_{7d}} \cdot f_{7d} \\
f'_{8d} &= \frac{D_{td8}}{V_{8d} \cdot Z_{8d}} \cdot f_8 - \frac{(D_{fd8} + D_{rd8})}{V_{8d} \cdot Z_{8d}} \cdot f_{8d} \\
f'_{9d} &= \frac{D_{td9}}{V_{9d} \cdot Z_{9d}} \cdot f_9 - \frac{(D_{fd9} + D_{rd9})}{V_{9d} \cdot Z_{9d}} \cdot f_{9d}
\end{aligned} \tag{1}$$

### 3. Výpočet řešení

Soustava (1) je řešena pomocí systémů Maple, Matlab a R-project. Analytické řešení je pomocí nich nalezeno „stejně“ – existující funkcí nalezneme vlastní čísla i vlastní vektory, funkcemi na řešení systému lineárních rovnic pak dohledáme hodnoty zbylých koeficientů řešení. Rozdílný přístup je v použití numerických metod pro řešení diferenciálních rovnic. Jejich přehled je uveden v tabulkách 1 a 2.

Tabulka 1: Srovnání dostupných metod v Maple

Název	Druh metody	Typ problému	Přesnost
foreuler	explicitní Eulerova metoda	ne-stiff	nízká
heunform	Heunova metoda	ne-stiff	nízká
impoly	vylepšená explicitní Eulerova metoda	ne-stiff	nízká
rk2	Rungeho-Kuttova metoda 2.řádu	ne-stiff	nízká
rk3	Rungeho-Kuttova metoda 3.řádu	ne-stiff	nízká
rk4	Rungeho-Kuttova metoda 4.řádu	ne-stiff	nízká
adambash	Adamsova-Bashforthova metoda	ne-stiff	??
abmoulton	Adamsova-Bashforthova-Moultonova metoda (predictor-corrector)	ne-stiff	??
rkf45	Fehlberg 4(5)	ne-stiff	střední až vysoká
dverk78	Verner 7(8)	ne-stiff	vysoká
gear	jednokroková Gearova metoda spolu s extrapolací	stiff	vysoká
lsode	*	stiff	vysoká
rosenbrock	Rosenbrockova metoda	stiff	střední až vysoká
taylorseries	Metoda Taylorova rozvoje	ne-stiff	vysoká

\* komplexní nástroj pro řešení všech typů obyčejných diferenciálních rovnic (tj. stiff i ne-stiff). Má v sobě implementovány dvě metody (Gearovu pro stiff problémy a Adamsovu metodu predictor-corrector pro ne-stiff problémy).

Tabulka 2: Srovnání dostupných metod v Matlabu

Název	Druh metody	Typ problému	Přesnost
ode23	Bogacki-Shampine 2(3)	ne-stiff	nízká
ode45	Dormand-Prince 5(4)	ne-stiff	střední
ode113	Adamsova-Bashforthova-Moultonova metoda (predictor-corrector)	ne-stiff	nízká až vysoká
ode15s	Gearova metoda	stiff	nízká až střední
ode23s	modifikovaná Rosenbrockova metoda 2. řádu	stiff	nízká až střední
ode23t	implementace lichoběžníkového pravidla	mírně stiff	nízká
ode23tb	*	stiff	nízká

\* implicitní dvoustupňová Rungeho-Kuttova metoda, v níž je prvním stupněm lichoběžníkové pravidlo a druhým metoda zpětných diferencí 2. řádu

Ze systému R (či R-project) byla použita pouze metoda *lsoda*. Podobně byly vyřazeny ze systému Maple všechny klasické metody (tj. Rungeho-Kuttovy metody, Eulerova metoda a další), které zdaleka nedosahují kvalit ostatních a slouží především studijním účelům.

## 4. Testování modelu

Pro účely testování byly zvoleny tři zástupci hlavních reprezentantů této skupiny látek tzv. PAHů (polycyklických aromatických uhlovodíků), konkrétně acenaftýlen, benzo(a)pyren a pyren. Výběr byl takový, aby pokryl celé spektrum vlastností zmíněných látek.

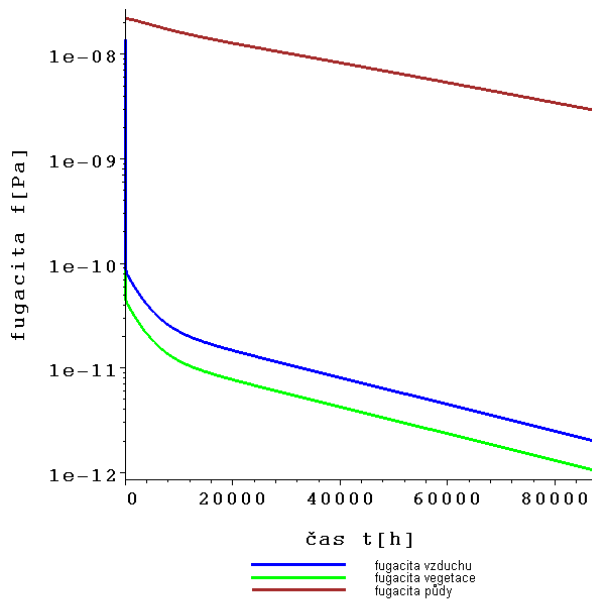
Pro tyto tři látky známe jak všechny potřebné koeficienty do systému diferenciálních rovnic, tak i počáteční hodnoty fugacit. Doplňme jen, že pro každou z látek řešíme systém samostatně.

Nejprve nalezneme řešení analyticky. Všechna vlastní čísla pro každou z látek vyjdou reálná, záporná a jednoduchá, tedy nulové řešení systému rovnic bude vždy exponenciálně stabilní. Přesný průběh řešení na dobu deseti let v hodinách poskytují grafy na obrázku 2. Pro možnost porovnání fugacit jednotlivých kompartmentů a „rozumného“ zobrazení celého průběhu řešení je voleno logaritmické měřítko funkčních hodnot. Pro každou z látek jsou znázorněny její fugacity ve vzduchu (modře), vegetaci (zeleně) a půdě (červenohnědě), přičemž fugacita v půdě je složena ze všech fugacit příslušejících tomuto kompartmentu podle toho, jak která vrstva půdy do celku přispívá. Konkrétně:

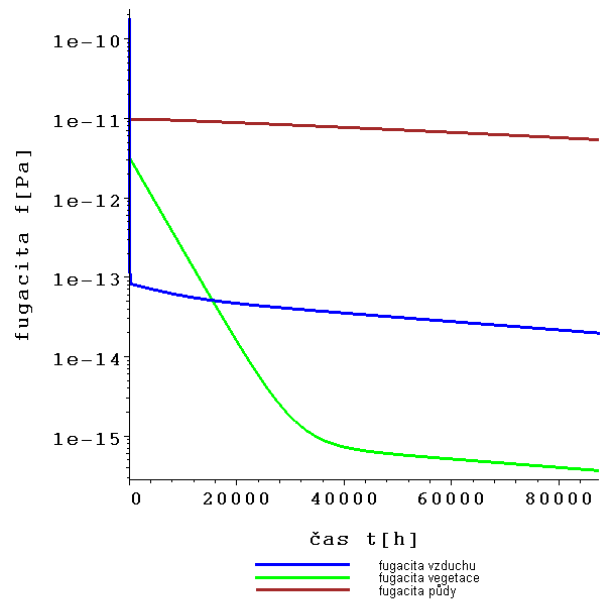
$$f_{\text{půda}} = 0.01 \cdot (f_3 + f_{3d}) + 0.03 \cdot (f_4 + f_{4d}) + 0.06 \cdot (f_5 + f_{5d}) + 0.1 \cdot (f_6 + f_{6d}) + 0.2 \cdot (f_7 + f_{7d}) + 0.5 \cdot (f_8 + f_{8d}) + 0.1 \cdot (f_9 + f_{9d}).$$

Numerické metody v testovaných softwareových systémech poskytují několik parametrů, které můžeme specifikovat a které ovlivní výpočet řešení. Naprosto zásadní z pohledu fungování metody jsou tolerance chyby, absolutní a relativní. Nic neovlivní výpočet metody tak, jak nastavení tolerance chyby. Dalšími parametry, které můžeme specifikovat (a které ovlivní dobu či přesnost výpočtu) jsou např. délky minimálního, maximálního a počátečního kroku nebo zadání Jacobiho matice systému. Pokud nezadáme některý z těchto parametrů, nic se z hlediska správnosti výpočtu nestane. Nenastavením tolerance chyby však můžeme obdržet zcela nesmyslné hodnoty výsledky, jako například záporné hodnoty řešení (viz obrázek 3).

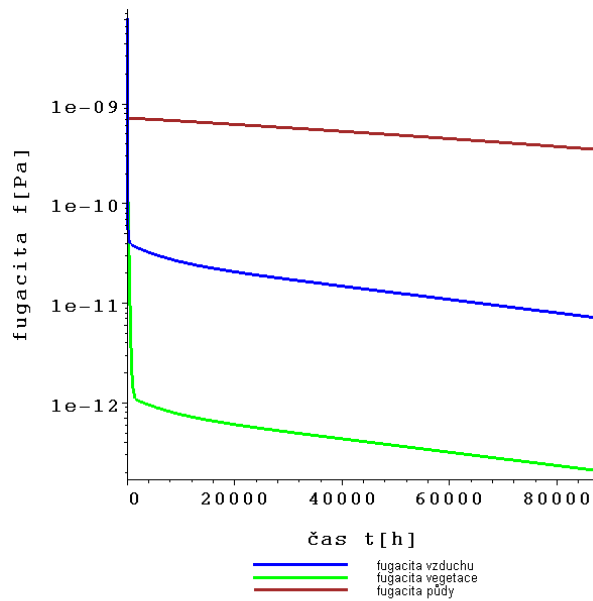
Se snižováním tolerance chyby se řešení zpřesňuje. Současně se však prodlužuje doba výpočtu, a tak je třeba najít optimální hodnoty tolerancí chyb, aby byl výpočet dostatečně přesný a přitom rychlý. Hlavním požadavkem pro korektnost řešení je jeho stabilita. Navíc se nesmí stát, že by řešení oscillovalo či vůbec někdy nabylo záporné hodnoty. Přestože požadavek na



**acenaftýlen**

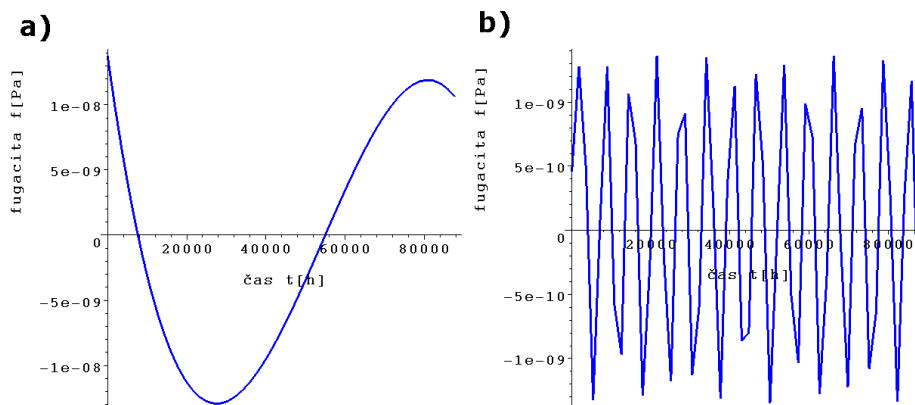


**benzo(a)pyren**



**pyren**

Obrázek 2: Grafické znázornění analytického řešení



Obrázek 3: Chybné nastavení tolerance chyby: a) Průběh fugacity ve vzduchu pro látku acenaftýlen a Rosenbrockovu metodu, b) Průběh fugacity ve vzduchu pro látku acenaftýlen a metodu Fehlberg 4(5)

konkrétní přesnost není z hlediska praxe tolik důležitý (podstatná je zmíněná stabilita řešení), my budeme požadovat, aby nejvyšší absolutní hodnota relativní chyby byla menší jak 1%. Řešení nás bude zajímat na dobu deseti let, přitom relativní chyby výpočtu budeme počítat v ekvidistantní síti 120 bodů (po 730 hodinách). Za přesné řešení považujeme řešení analytické, jehož dostatečnou přesnost (v porovnání s numerickým řešením) je třeba zaručit (a dokázat), neboť i toto řešení je zatíženo chybou (zaokrouhlovací).

Testováním nastavení tolerancí chyb za dodržení předchozích podmínek dospějeme k požadovaným optimálním hodnotám uvedeným v tabulkách 3 a 4. Jedná se o hodnoty tolerance absolutní chyby (označováno jako *abserr*). Výsledné řešení nabývá od počátku velmi nízkých hodnot, navíc rychle klesá, a proto základní nastavení na hodnotu  $1 \cdot 10^{-3}$  ve většině případů vyhovuje a není třeba jej měnit. V případech, kdy je nutné přísnější nastavení, je tato hodnota uvedena pod tabulkou (označeno jako *relerr*).

Tabulka 3: Optimální hodnoty tolerancí chyb - Maple

látka \ metoda	rosenbrock	rkf45	dverk78	lsode	gear	taylor
acenaftýlen	$3 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-14}$	1	$2 \cdot 10^{-15}$ *	$2 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-12}$
benzo(a)pyren	$3 \cdot 10^{-15}$	$5 \cdot 10^{-16}$	1	$8 \cdot 10^{-19}$ **	$2 \cdot 10^{-16}$	$9 \cdot 10^{-15}$
pyren	$1 \cdot 10^{-11}$	$7 \cdot 10^{-16}$	1	$6 \cdot 10^{-17}$	$9 \cdot 10^{-17}$	$1 \cdot 10^{-13}$

\* *relerr* =  $1 \cdot 10^{-4}$ , \*\* *relerr* =  $1 \cdot 10^{-5}$

Tabulka 4: Optimální hodnoty tolerancí chyb - Matlab a R

látka \ metoda	ode23	ode45	ode113	ode15s	ode23s	ode23t	ode23tb	lsoda
acenaftýlen	$9 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-11}$	$9 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-10}$
benzo(a)pyren	$1 \cdot 10^{-16}$	$2 \cdot 10^{-16}$	$3 \cdot 10^{-17}$ *	$1 \cdot 10^{-17}$	$1 \cdot 10^{-17}$ *	$1 \cdot 10^{-17}$ *	$7 \cdot 10^{-18}$	$8 \cdot 10^{-17}$
pyren	$6 \cdot 10^{-14}$	$8 \cdot 10^{-14}$	$1 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-14}$ *	$2 \cdot 10^{-14}$	$4 \cdot 10^{-14}$	$4 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-14}$ *

\* *relerr* =  $1 \cdot 10^{-4}$

U metody *dverk78* značí hodnota 1 libovolné nastavení. Metoda je sama o sobě tak přesná, že není třeba jakkoli omezovat její výpočet. Především tabulky uvádí hodnoty pro jednotlivé látky, my však můžeme jít ještě hlouběji a podívat se na optimální nastavení tolerancí chyb i pro jednotlivé kompartmenty, abychom zjistili jejich citlivost.

Tabulka 5: Citlivost nastavení tolerancí chyb - Maple

acenaftylen					
kompartment \ metoda	rosenbrock	rkf45	lsode	gear	taylor
vzduch	$3 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-12}$	$2 \cdot 10^{-15}$ *	$3 \cdot 10^{-13}$	$5 \cdot 10^{-10}$
vegetace	$3 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-15}$ *	$2 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-12}$
půda	$1 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-9}$	$2 \cdot 10^{-14}$ *	$3 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-6}$
benzo(a)pyren					
kompartment \ metoda	rosenbrock	rkf45	lsode	gear	taylor
vzduch	$4 \cdot 10^{-12}$	$5 \cdot 10^{-16}$	$4 \cdot 10^{-14}$ *	$2 \cdot 10^{-16}$	$9 \cdot 10^{-15}$
vegetace	$3 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-13}$	$8 \cdot 10^{-19}$ **	$2 \cdot 10^{-13}$	$9 \cdot 10^{-11}$
půda	$2 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-10}$	$8 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-9}$
pyren					
kompartment \ metoda	rosenbrock	rkf45	lsode	gear	taylor
vzduch	$1 \cdot 10^{-11}$	$3 \cdot 10^{-14}$	$6 \cdot 10^{-17}$	$7 \cdot 10^{-15}$	$8 \cdot 10^{-12}$
vegetace	$1 \cdot 10^{-11}$	$7 \cdot 10^{-16}$	$6 \cdot 10^{-17}$	$9 \cdot 10^{-17}$	$1 \cdot 10^{-13}$
půda	$2 \cdot 10^{-10}$	$7 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-14}$	$5 \cdot 10^{-11}$	$1 \cdot 10^{-8}$

\*  $relerr = 1 \cdot 10^{-4}$ , \*\*  $relerr = 1 \cdot 10^{-5}$

Tabulka 6: Citlivost nastavení tolerancí chyb - Matlab

acenaphtylene				
kompartment \ metoda	ode23	ode45	ode113	ode15s
vzduch	$4 \cdot 10^{-13}$	$7 \cdot 10^{-13}$	$9 \cdot 10^{-14}$	$1 \cdot 10^{-9}$
vegetace	$9 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-14}$	$2 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-9}$
půda	$8 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-9}$
benzo(a)pyren				
kompartment \ metoda	ode23	ode45	ode113	ode15s
vzduch	$1 \cdot 10^{-16}$	$2 \cdot 10^{-16}$	$3 \cdot 10^{-17}$ *	$4 \cdot 10^{-13}$
vegetace	$5 \cdot 10^{-14}$	$6 \cdot 10^{-14}$	$8 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-17}$
půda	$1 \cdot 10^{-10}$	$2 \cdot 10^{-10}$	$4 \cdot 10^{-11}$	$4 \cdot 10^{-13}$
pyren				
kompartment \ metoda	ode23	ode45	ode113	ode15s
vzduch	$6 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-13}$	$1 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-11}$
vegetace	$5 \cdot 10^{-13}$	$8 \cdot 10^{-14}$	$9 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-14}$ *
půda	$3 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$6 \cdot 10^{-10}$	$4 \cdot 10^{-11}$ *

\*  $relerr = 1 \cdot 10^{-4}$

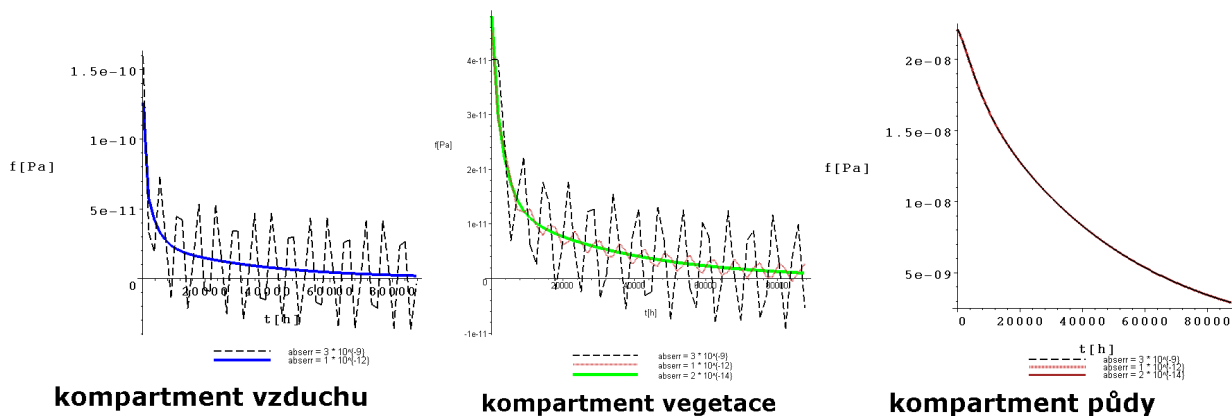
Tabulka 7: Citlivost nastavení tolerancí chyb - Matlab and R

acenaphtylene				
kompartment \ metoda	ode23s	ode23t	ode23tb	lsoda
vzduch	$2 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-11}$	$9 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-10}$
vegetace	$2 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-11}$	$9 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-10}$
půda	$2 \cdot 10^{-9}$	$1 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-10}$
benzo(a)pyren				
kompartment \ metoda	ode23s	ode23t	ode23tb	lsoda
vzduch	$5 \cdot 10^{-12}$ *	$1 \cdot 10^{-14}$	$3 \cdot 10^{-12}$ *	$4 \cdot 10^{-13}$
vegetace	$1 \cdot 10^{-17}$ *	$1 \cdot 10^{-17}$ *	$7 \cdot 10^{-18}$	$8 \cdot 10^{-17}$
půda	1	$1 \cdot 10^{-10}$ *	1	$8 \cdot 10^{-13}$
pyren				
kompartment \ metoda	ode23s	ode23t	ode23tb	lsoda
vzduch	$8 \cdot 10^{-11}$	$3 \cdot 10^{-11}$	$9 \cdot 10^{-11}$	$2 \cdot 10^{-11}$
vegetace	$4 \cdot 10^{-9}$	$4 \cdot 10^{-14}$	$4 \cdot 10^{-14}$	$7 \cdot 10^{-14}$ *
půda	$2 \cdot 10^{-14}$	$6 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{-9}$	$3 \cdot 10^{-11}$

\*  $relerr = 1 \cdot 10^{-4}$

Tabulky 5-7 interpretuje graficky pro metodu Fehlberg (rkf45) a látku acenaftylen v systému Maple obrázek 4.

Testováním nastavení i zbylých parametrů metod lze dospět ke zcela optimálnímu nastavení a průběhu výpočtu. Pro takové nastavení byl proveden test rychlosti výpočtu a průměrné přesnosti jednotlivých metod. Všechny výpočty byly prováděny na osobním počítači Intel Celeron



Obrázek 4: Citlivost nastavení absolutní tolerance chyby pro metodu Fehlberg 4(5) a látku acenaftylen

(procesor: 2.53 GHz, paměť: 2 GB RAM, operační systém: Windows XP Home SP2) se systémy Maple (verze 11), Matlab (verze 7.0.4) a R-project (verze 2.6.2).

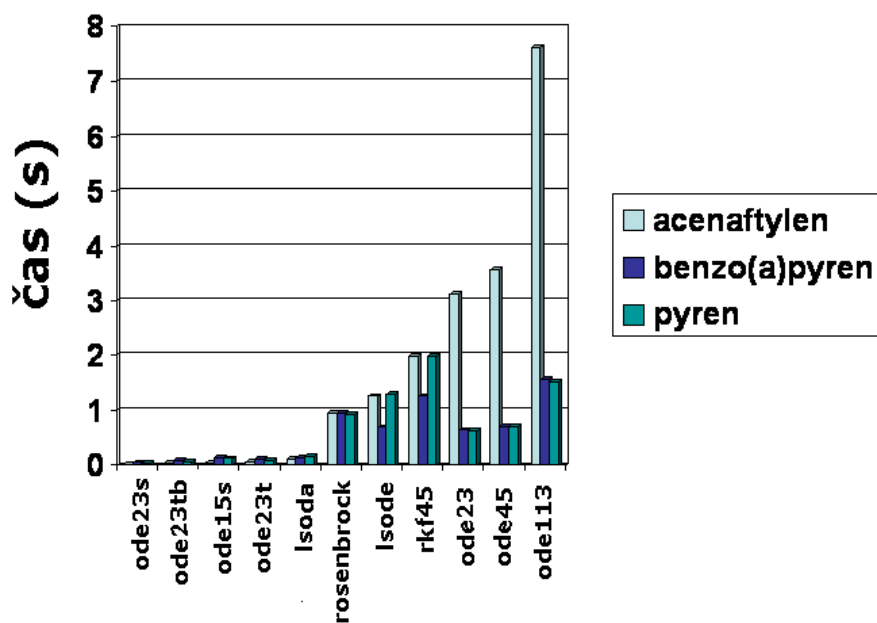
Časem výpočtu metody byla stanovena doba, za niž metoda vrátí hodnoty řešení ve všech 120 ekvidistantních bodech (v těch samých, v nichž měříme i přesnost výpočtu). Tabulka 9 uvádí průměrné a nejhorší zaznamenané hodnoty, vše v sekundách.

Tabulka 8: Rychlost výpočtu numerických metod

metoda	acenaftylen		benzo(a)pyren		pyren	
	nej. čas	prům. čas	nej. čas	prům. čas	nej. čas	prům. čas
rosenbrock	1.000 s	0.945 s	1.016 s	0.948 s	0.969 s	0.926 s
rkf45	2.000 s	1.981 s	1.266 s	1.255 s	2.000 s	1.984 s
lsode	1.344 s	1.256 s	0.766 s	0.693 s	1.391 s	1.301 s
gear	7.905 s	7.859 s	2.125 s	2.102 s	7.860 s	7.844 s
ode23	3.125 s	3.109 s	0.656 s	0.640 s	0.640 s	0.632 s
ode45	3.578 s	3.563 s	0.719 s	0.710 s	0.719 s	0.711 s
ode113	7.625 s	7.609 s	1.578 s	1.563 s	1.531 s	1.523 s
ode15s	0.047 s	0.040 s	0.141 s	0.133 s	0.141 s	0.129 s
ode23s	0.031 s	0.019 s	0.063 s	0.052 s	0.047 s	0.035 s
ode23t	0.078 s	0.068 s	0.125 s	0.109 s	0.109 s	0.097 s
ode23tb	0.047 s	0.041 s	0.094 s	0.091 s	0.078 s	0.070 s
lsoda	0.140 s	0.120 s	0.150 s	0.142 s	0.170 s	0.158 s

Grafickou ilustraci tabulky 8 poskytuje obrázek 5.





Obrázek 5: Srovnání rychlostí výpočtu numerických metod

Na závěr ještě doplňme dvě tabulky uvádějící průměrnou absolutní hodnotu relativní chyby (v procentech) jednotlivých metod v síti 120 ekvidistantních bodů.

Tabulka 9: Průměrná hodnota relativní chyby metod I

acenaftylen						
fáze	rosenbrock	rkf45	lsode	gear	ode23	ode45
vzduch	0.015 %	0.003 %	0.410 %	0.004 %	0.005 %	0.001 %
vegetace	0.015 %	0.150 %	0.405 %	0.021 %	0.235 %	0.064 %
půda	0.005 %	$0.2 \cdot 10^{-7}$ %	0.128 %	$1.0 \cdot 10^{-8}$ %	$7.4 \cdot 10^{-8}$ %	$1.9 \cdot 10^{-8}$ %
benzo(a)pyren						
fáze	rosenbrock	rkf45	lsode	gear	ode23	ode45
vzduch	0.003 %	0.344 %	0.040 %	0.007 %	0.229 %	0.189 %
vegetace	0.116 %	0.009 %	0.090 %	$0.2 \cdot 10^{-4}$ %	$6.2 \cdot 10^{-4}$ %	$5.0 \cdot 10^{-4}$ %
půda	$0.3 \cdot 10^{-4}$ %	$0.6 \cdot 10^{-7}$ %	0.013 %	$0.6 \cdot 10^{-7}$ %	$1.4 \cdot 10^{-8}$ %	$1.2 \cdot 10^{-8}$ %
pyren						
fáze	rosenbrock	rkf45	lsode	gear	ode23	ode45
vzduch	0.029 %	0.004 %	0.100 %	0.001 %	0.348 %	0.177 %
vegetace	0.028 %	0.212 %	0.101 %	0.007 %	0.038 %	0.018 %
půda	0.007 %	$0.2 \cdot 10^{-7}$ %	0.057 %	$0.4 \cdot 10^{-8}$ %	$2.8 \cdot 10^{-7}$ %	$1.4 \cdot 10^{-7}$ %

Tabulka 10: Průměrná hodnota relativní chyby metod II

acenaftylen						
fáze	ode113	ode15s	ode23s	ode23t	ode23tb	lsoda
vzduch	0.003 %	0.255 %	0.388 %	0.151 %	0.263 %	0.034 %
vegetace	0.161 %	0.255 %	0.386 %	0.138 %	0.262 %	0.033 %
půda	$9.4 \cdot 10^{-7}$ %	0.076 %	0.106 %	0.079 %	$7.4 \cdot 10^{-8}$ %	0.005 %
benzo(a)pyren						
fáze	ode113	ode15s	ode23s	ode23t	ode23tb	lsoda
vzduch	0.135 %	0.001 %	0.006 %	0.004 %	0.007 %	$1.4 \cdot 10^{-6}$ %
vegetace	$5.2 \cdot 10^{-4}$ %	0.191 %	0.250 %	0.194 %	0.340 %	0.229 %
půda	$7.8 \cdot 10^{-7}$ %	$1.3 \cdot 10^{-4}$ %	0.001 %	0.001 %	$7.2 \cdot 10^{-4}$ %	$1.1 \cdot 10^{-5}$ %
pyren						
fáze	ode113	ode15s	ode23s	ode23t	ode23tb	lsoda
vzduch	0.153 %	0.005 %	0.050 %	0.047 %	0.039 %	0.008 %
vegetace	0.016 %	0.029 %	0.060 %	0.057 %	0.049 %	0.173 %
půda	$1.0 \cdot 10^{-6}$ %	$4.8 \cdot 10^{-4}$ %	0.001 %	0.001 %	0.001 %	$7.6 \cdot 10^{-4}$ %

## 5. Závěr

Byly testovány tři různé systémy při řešení problémů box modelů s cílem zvolit nejvhodnější variantu výpočtu. Maple a Matlab jsou systémy komerční, jazyk R je volně dostupný. Všechny jsou použitelné, ovšem nejvíce nevýhod (oproti zbylým ICT) jsem upozoroval na posledně jmenovaném systému.

Maple a Matlab hodnotím rovnocenně, každý má oproti druhému nějakou výhodu a nějakou nevýhodu, je však těžké říci, který je lepší. Maple například disponuje velkou přesností svých výpočtů, Matlab naopak jejich rychlostí. Konkrétní volbu právě jednoho systému by určilo zvolení užší oblasti řešeného problému.

Použitím tří různých nástrojů se nabízí možnost jejich spojení. Byla testována všechna možná propojení použitých ICT, s výjimkou jednoho žádné nepřineslo nic užitečného. Touto výjimkou je nástroj zvaný Maple toolbox for Matlab, který umožňuje současnou práci v obou systémech zároveň a sdílení dat mezi nimi. Velmi výhodné toto může být právě při řešení komplexnějších úloh, z nichž část řešíme v Matlabu, část v Maple, či při testování.

## Poděkování

Tento článek vychází z diplomové práce vytvořené na Masarykově univerzitě pod vedením profesora Jiřího Hřebíčka. Byl podpořen projektem INCHEMBIOL (MSM0021622412). Rád bych poděkoval svým dvěma konzultantům a tvůrcům představeného modelu Jiřímu Komprdovi a Kláře Kubošové a v neposlední řadě i doktoru Jiřímu Jarkovskému za jejich ochotu, časté porady a mnoho věnovaného času.

## Reference

- [1] Kalas, Josef. Ráb, Miloš. *Obyčejné diferenciální rovnice*. Brno, 2001.
- [2] Komprda, Jiří. Kubošová, Klára. Holoubek, Ivan. *The application of a steady and unsteady state environmental distribution models on environmental concentrations of PAHs measured in Košetice station between 1996 and 2004*. 6th International Symposium on Environmental Software Systems. Praha, 2007.
- [3] Mackay, Donald. *Multimedia Environmental Models: Fugacity approach*. Lewis Publishers, 1991.
- [4] *Math Software for Engineers, Educators & Students – Maplesoft*. [Online]. URL: <http://www.maplesoft.com/> (září 2008).
- [5] *POPs centrum pro střední a východní Evropu*. [Online]. URL: <http://www.recetox.muni.cz/pops-centrum/> (září 2008)
- [6] *The MathWorks – MATLAB and Simulink for Technical Computing*. [Online]. URL: <http://www.mathworks.com/> (září 2008).
- [7] *The R Project for Statistical Computing*. [Online]. URL: <http://www.r-project.org/> (září 2008).