

УДК 519.63

Семенчин Е.А., Кузякина М.В., Лоскутова Е.О.

Semenchin E.A., Kuzyakina M.V., Loskutova E.O.

Обратные задачи о мощности точечного источника в математической модели рассеяния примеси в атмосфере

Inverse problems of point source power in mathematical model of admixture dispersion in the atmosphere

В статье предлагаются два новых алгоритма расчета мощности точечного источника непрерывного действия в рамках математической модели рассеяния примеси в атмосфере. Один из них позволяет производить расчеты мощности источника по экспериментально заданным значениям параметров модели и концентрации примеси в атмосфере; другой – производить расчеты мощности источника по тем же значениям параметров модели, но вместо значений концентрации требует использования значений плотности осадка на подстилающей поверхности и скорости сухого осаждения ее частиц. Оба алгоритма реализованы в программных продуктах (соответственно в средах Maple и Delphi). Приведен сравнительный анализ этих алгоритмов.

In this paper two new algorithms for calculating the power of a continuous action point source are presented in mathematical model of admixture dispersion in the atmosphere. One of the algorithms in question allows performing source power calculations using experimentally given model parameters' values and concentrations of admixture in the atmosphere; the other one allows making source power calculations using the same model parameters' values, but instead of concentration values it requires the values of sediment density on an underlying surface and the speed of dry deposition of admixture particles. Both approaches have been realized in computer programs (using

MAPLE and Delphi respectively). Comparative analysis of the algorithms is given.

Ключевые слова: мощность источника, концентрация примеси, плотность осадка, подстилающая поверхность, фильтрация, регуляризация.

Key words: source power, admixture concentration, sediment density, underlying surface, filtration, regularization.

1. Постановка задачи. Математическая модель, описывающая процесс рассеяния примеси в атмосфере имеет вид [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + U \frac{\partial q}{\partial x} - W \frac{\partial q}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q}{\partial z} + f, \end{aligned} \quad (1)$$

$$t \in [t_0, T],$$

$$q(t_0, x, y, z) = \varphi(x, y, z), \quad (2)$$

$$\left\{ K_z \frac{\partial q}{\partial z} + Wq \right\} \Big|_{z=z_0} = \{V_s q\} \Big|_{z=z_0}, \quad (3)$$

$$q(t, x, y, z) \rightarrow 0, \quad x^2 + y^2 + z^2 \rightarrow \infty, \quad z \geq z_0, \quad (4)$$

где $q(t, x, y, z)$ – средняя концентрация примеси в точке $(x, y, z) \in E_+^3$, $E_+^3 = \{(x, y, z) : x, y \in (-\infty; \infty), z \geq z_0 \geq 0\}$, в момент времени t ; K_x , K_y , K_z – коэффициенты турбулентной диффузии соответственно вдоль осей Ox , Oy , Oz ; U – компонента средней скорости ветра вдоль оси Ox ; W – скорость осадения частиц примеси вдоль оси Oz ; $\varphi(x, y, z)$, f , V_s – соответственно фоновая концентрация, функция источника, скорость сухого осадения этой примеси; $z_0 = \text{const} \geq 0$ – уровень шероховатости подстилающей поверхности.

Для расчета количества примеси, выпадающей из атмосферы на подстилающую поверхность, можно использовать соотношение [1]

$$\bar{P}(t, x, y, z_0) = \int_0^t P(\tau, x, y, z_0) d\tau, \quad (5)$$

где $\bar{P}(t, x, y, z_0)$ – плотность осадка в точке (x, y) , расположенной на плоскости $z = z_0$ за время действия источника t , $P(t, x, y, z_0) = V_s q(t, x, y, z_0)$ – вертикальный поток частиц в точке (x, y, z_0) в момент времени t , $V_s = \text{const} > 0$ – скорость сухого осаждения частиц этой примеси.

Соотношения (1)–(5) определяют математическую модель процесса осаждения примеси на плоскость $z = z_0$, $z_0 \geq 0$ [3].

Для вычисления $\bar{P}(t, x, y, z_0)$ авторами данной работы разработан алгоритм в интегрированной среде Delphi, реализованный в программном продукте «DODS». Программа «DODS» зарегистрирована в отраслевом фонде алгоритмов и программ под номером 9293 [2].

Кроме того, в рамках модели (1)–(5) подробно исследованы [4] следующие важные (с прикладной точки зрения) задачи для точечного источника мгновенного действия:

задача 1 - определить точку (x, y) , расположенную на плоскости $z = z_0$, в которой плотность осадка $\bar{P}(t, x, y, z_0)$ в момент времени t , $t \in [t_0, T]$ принимает максимальное значение;

задача 2 - определить интервал времени $(0, t)$ максимальной длины, в течение которого плотность осадка $\bar{P}(t, x, y, z_0)$ в точке (x, y, z_0) не превысит заданной величины $\hat{P}$ (т. е. $\bar{P}(t, x, y, z_0) \leq \hat{P}$), где $\hat{P}$ – предельно допустимое значение плотности $\bar{P}(t, x, y, z_0)$ на подстилающей поверхности, превышение которого становится небезопасным (согласно медицинским нормам) для здоровья людей.

В продолжение исследований [4,5] в данной работе будут представлены результаты исследований следующих задач, которые являются обратными в рамках модели (1)–(5):

задача 3 - определить мощность $Q(t)$ точечного источника непрерывного действия по экспериментально заданным плотности осадка на подстилающей поверхности $\bar{P}(t, x, y, z_0)$, скорости сухого осаждения частиц примеси V_s , основным параметрам модели (1)–(4): U , W , K_x , K_y , K_z , и координатам источника $(0, 0, H)$;

задача 4 - определить мощность $Q(t)$ точечного источника непрерывного действия по экспериментально заданным значениям концентрации примеси $q(t, x, y, z)$, основным параметрам модели (1)–(4): U , W , K_x , K_y , K_z , и координатами источника $(0, 0, H)$.

2. Методика решения задачи 3. При решении обратной задачи 3 из п. 1 будем предполагать, что коэффициенты турбулентной диффузии и функция источника $f(t, x, y, z)$ имеют вид:

$$\begin{aligned} U &= \text{const}, K_x = K_y = K_0 U, \\ K_0 &= \text{const}, K_z = K_2 z^n, \\ K_2 &= \text{const}, n = \text{const}, 0 < n < 2, \\ f(t, x, y, z) &= Q(t) \delta(x) \delta(y) \delta(z - H), \end{aligned}$$

где $\delta(s - s_0)$ – дельта-функция Дирака, $Q(t)$ – количество примеси, выбрасываемой источником в момент времени t .

Тогда, согласно [1], $\bar{P}(t, x, y, z_0)$ можно представить в виде

$$\bar{P}(t, x, y, z_0) = V_s \int_0^t \int_0^\tau q(s, x_0, y_0, H; \tau, x, y, z_0) Q(s) ds d\tau, \quad (6)$$

где $q(s, x_0, y_0, H; \tau, x, y, z_0)$ - функция Грина задачи (1)-(4).

Таким образом, задача 3 сводится к решению интегрального уравнения относительно $Q(s)$ при заданных значениях $\bar{P}(t, x, y, z_0)$ и $q(s, x_0, y_0, H; \tau, x, y, z_0)$ (определяемой из [1]). Соотношение (6) представляет собой интегральное уравнение первого рода относительно неизвестной функции $Q(t)$. Задача построения решения таких уравнений является некорректно поставленной [6]. Поэтому для численного решения (6)

относительно $Q(\tau)$ воспользуемся методом регуляризации (по А. Н. Тихонову). Согласно методу регуляризации задачу построения решения $Q(s)$ уравнения (6) можно свести к минимизации функционала вида

$$\begin{aligned} \bar{P}^\mu(Q) &= \|\bar{P}Q - \bar{P}_\delta\|_{L_2[0,t]}^2 + \mu \|Q\|_{L_2[0,t]}^2 = \\ &= \int_0^T (V_s \int_0^t q(s, 0, 0, H; \tau, x, y, z) Q(s) ds d\tau - \\ &\quad - \bar{P}_\delta(\tau, x, y, z))^2 dt + \mu \int_0^t Q^2(\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\bar{P}(\bullet) = \int_0^t ds \int_0^s q(s, x_0, y_0, H; \tau, x, y, z_0)(\bullet) d\tau$, $\bar{P}_\delta$ – экспериментальные (приближенные) значения плотности осадка $\bar{P}$; μ – параметр регуляризации.

Пусть $Q(\tau)$ представляет собой полином вида:

$$Q = \sum_{i=0}^N C_i \tau^i, \quad C_i = \text{const}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (8)$$

Тогда задача определения функции $Q(s)$ сводится к решению системы алгебраических уравнений относительно C_i , $i = 1, \dots, N$:

$$\begin{aligned} &\left(\left(\bar{P} \tau^i, \bar{P} \tau^j \right) \right)_{i=1, \dots, N}^{j=1, \dots, N} + \mu \int_0^t \tau^{i+j} d\tau \begin{pmatrix} j=1, \dots, N \\ i=1, \dots, N \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} C_1 \\ C_N \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \int_0^t \bar{P} \tau^i \bar{P}_\delta d\tau \\ \int_0^t \bar{P} \tau^j \bar{P}_\delta d\tau \end{pmatrix}_{i=1, \dots, N}. \end{aligned} \quad (9)$$

Систему (9) можно переписать в матричном виде:

$$(\Gamma + \mu R)C = V, \quad (10)$$

где $\Gamma = \|\varrho_{ij}\|$ – матрица Грамма с элементами $\varrho_{ij} = (\bar{P} \tau^i, \bar{P} \tau^j)$, C_i – вектор-столбец неизвестных, V – вектор с элементами вида $(\bar{P} \tau^i, \bar{P}_\delta)$, $R = \|r_{ij}\|$ – матрица размера $N \times N$, $r_{ij} = (\tau^i, \tau^j)$.

Так как матрица $(\Gamma + \mu R)$ симметрична и положительно определена, то систему линейных алгебраических уравнений (10) можно решить методом Холецкого [8].

Параметр регуляризации μ в (10) определяется методом подбора или с помощью соотношения [7]:

$$\varphi(\mu) = \int_0^T (V_s \int_{00}^{t\tau} q(s, 0, 0, H; \tau, x, y, z_0) Q_\mu(s) ds d\tau - \bar{P}_\delta(\tau, x, y, z_0))^2 dt = \delta^2, \quad (11)$$

где $Q_\mu(s)$ – решение интегрального уравнения (6), δ – заданная погрешность, $\delta \rightarrow 0$.

Для численного решения уравнения (6) методом регуляризации авторами разработан алгоритм, реализованный в виде программного продукта «IPIS».

3. Пример решения задачи 3. Для оценки качества работы алгоритма из пункта 2 воспользуемся экспериментальными данными, взятыми из отчетов центра лабораторного анализа и технических измерений по Южному Федеральному округу (ЦЛАТИ по ЮФО) и содержащими информацию о выбросах в атмосферу загрязняющих веществ (диоксид азота). Согласно этим данным: $H = 20$ м, $U = 2,5$ (м/с), $K_0 = 0,1$ м, $K_2 = 0,1$ м, $n = 0,15$, $t_0 = 0$ с, $t = 55$ с, $V_s = 0,1$ (м/с), $Q(t) = 2,7t$ (кг/с).

В начале рассчитаем значения плотности осадка $\bar{P}$ численно, решив прямую задачу с помощью программы «DODS». Затем восстановим значения $Q(t)$ (т.е. найдем решение обратной задачи) с помощью программы «IPIS». Сравним значения восстановленной и заданной мощностей (графическая визуализация результатов проведенных расчетов приведена на рисунке 1).

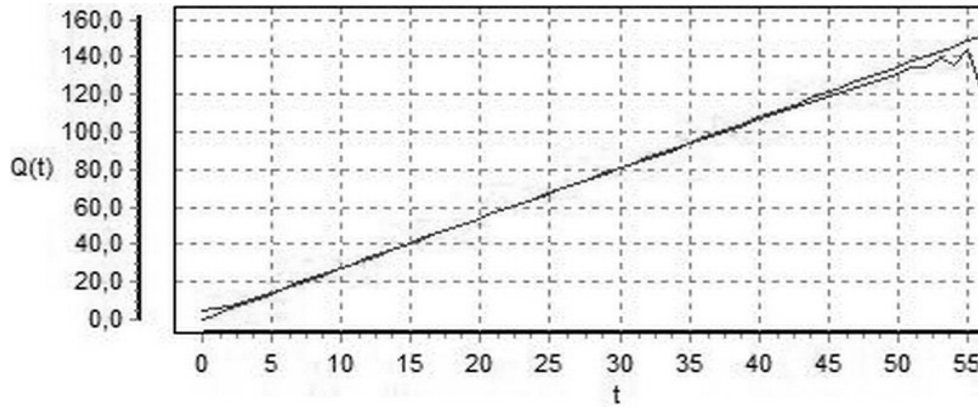


Рисунок 1 – Графическое изображение значений экспериментальной (гладкая линия) и расчетной (ломанная линия) мощностей источника примеси

Согласно рисунку 1 расчетные значения мощности источника $Q(t)$ с высокой степенью точности согласуются с экспериментальными значениями $Q(t)$ (см. рисунок 1). В данном примере параметр регуляризации μ равен $\mu = 10^{-8}$.

4. Методика решения задачи 4. Пусть при решении задачи 4 из п.1 в математической модели (1)–(4) фоновая концентрация $\varphi(x, y, z)$ не учитывается, т.е. $\varphi(x, y, z) \equiv 0$, начальный момент времени $t_0 = 0$.

Из (1) следует, что

$$f(t, x, y, z) = \frac{\partial q}{\partial t} + U \frac{\partial q}{\partial x} - W \frac{\partial q}{\partial z} + \alpha q - \\ - \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} K_y \frac{\partial q}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial q}{\partial z}.$$

Если источник f в (1) является точечным с координатами (x_0, y_0, H) , то, учитывая соотношение

$$f(t, x, y, z) = Q(t) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - H),$$

легко убедиться, что если в (1) f заменить на $Q(t)$, то решение задачи (1)–(4) не изменится:

$$Q(t) = \frac{\partial q}{\partial t} + U \frac{\partial q}{\partial x} - w \frac{\partial q}{\partial z} + \alpha q -$$

$$-\frac{\partial}{\partial x}K_x\frac{\partial q}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial y}K_y\frac{\partial q}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial z}K_z\frac{\partial q}{\partial z}. \quad (12)$$

Согласно (12) для вычисления значений $Q(t)$ требуется предварительно вычислить значения производных функции $q(t, x, y, z)$ по t , x , y , z (по x , y , z – до второго порядка включительно).

Задача нахождения производной n -го порядка $z(t)$ функции $u(t)$, т.е. $z(t) = u^{(n)}(t)$, сводится к решению (относительно $z(t)$) интегрального уравнения первого рода [6]:

$$\int_0^t \frac{1}{(n-1)!} (t-\tau)^{n-1} z(\tau) d\tau = u(t), \quad u(0) = 0. \quad (13)$$

Обозначая

$$\begin{aligned} R_{zz}(t, x, y, z) &= \frac{\partial^2 q(t, x, y, z)}{\partial z^2}, \quad R_{yy}(t, x, y, z) = \frac{\partial^2 q(t, x, y, z)}{\partial y^2}, \\ R_{xx}(t, x, y, z) &= \frac{\partial^2 q(t, x, y, z)}{\partial x^2}, \quad R_z(t, x, y, z) = \frac{\partial q(t, x, y, z)}{\partial z}, \\ R_x(t, x, y, z) &= \frac{\partial q(t, x, y, z)}{\partial x}, \quad R_t(t, x, y, z) = \frac{\partial q(t, x, y, z)}{\partial t}, \end{aligned}$$

согласно (13) для определения $R_{zz}(t, x, y, z)$ будем иметь интегральное уравнение:

$$q(t, x, y, z) = \int_0^z (z-\tau) \cdot R_{zz}(t, x, y, \tau) d\tau \quad (14)$$

Соотношение (14) представляет собой интегральное уравнение первого рода относительно неизвестной функции R_{zz} . Задача построения решения таких уравнений является некорректно поставленной [6]. При решении этой задачи перейдем от (14) к его дискретному аналогу:

$$q(t, x, y, z) = \sum_{k=1}^p \left[(z_p - z_k) R_{zz}(t, x, y, z_k) \cdot r_k \right], \quad (15)$$

$$r_k = \begin{cases} \frac{z_2 - z_1}{2}, & k=1, \\ \frac{z_{k+1} - z_{k-1}}{2}, & k=2, \dots, (p-1), \\ \frac{z_p - z_{p-1}}{2}, & k=p, \end{cases}$$

$z_1, \dots, z_p$ - точки деления интервала $[0, z]$.

Согласно (15) по значениям $q(t_1, x, y, z), \dots, q(t_N, x, y, z)$, заданным в точке (x, y, z) в различные моменты времени $t_1, \dots, t_N$, с ошибками измерения $v_1 = \tilde{v}(t_1), v_2 = \tilde{v}(t_2), \dots, v_N = \tilde{v}(t_N)$, $\tilde{v}(t)$ – белый гауссов шум, $t = t_1, \dots, t_N$, требуется найти значения $R_{zz}(t_1, x, y, z_k), \dots, R_{zz}(t_N, x, y, z_k)$, $k = 1, \dots, p$.

Введем в рассмотрение матрицу $A = (A_{ik})$:

$$A_{ik} = (z_p - z_k) \cdot r_k, \quad k = 1, \dots, p, \quad i = 1, \dots, N.$$

Тогда с учетом введенных обозначений и замечаний (15) можно представить в виде системы:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{k=1}^p [A_{1k} \cdot R_{zz}(t_1, x, y, z_k)] + v_1 = q(t_1, x, y, z), \\ \sum_{k=1}^p [A_{2k} \cdot R_{zz}(t_2, x, y, z_k)] + v_2 = q(t_2, x, y, z), \\ \\ \sum_{k=1}^p [A_{Nk} \cdot R_{zz}(t_N, x, y, z_k)] + v_N = q(t_N, x, y, z). \end{array} \right. \quad (16)$$

Систему (16) представим в матричном виде:

$$AR_{zz} + \tilde{v} = q. \quad (17)$$

Для подавления влияния белого шума $\tilde{v}(t)$ на $R_{zz}(t_k, x, y, z_p)$, $k = 1, \dots, N$, можно использовать фильтр Калмана-Бьюси [9]. Тогда оптимальная в среднем квадратическом смысле апостериорная оценка R_{zz} решения R_{zz} системы (17) может быть найдена из соотношений:

$$\begin{aligned} R_{zz} &= \phi + PA^T R^{-1} (q_i - A\phi), \\ \phi &= M[R_{zz}], \quad P = (N^{-1} + A^T R^{-1} A)^{-1}, \\ N &= M[(R_{zz} - \phi)(R_{zz} - \phi)^T], \quad R = M[\tilde{v}\tilde{v}^T]. \end{aligned}$$

Аналогичным образом определяются R_{xx} , R_{yy} , R_t , R_x , R_z соответственно для R_{xx} , R_{yy} , R_t , R_x , R_z . Подставляя найденные оценки в (12), получим наилучшую в среднем квадратическом смысле оценку $Q(t_k)$ значения $Q(t_k)$:

$$Q(t_k) = R_t + U \cdot R_x - W \cdot R_z + \alpha \cdot q - \\ - K_x \cdot R_{xx} - K_y \cdot R_{yy} - K_z \cdot R_{zz}, \quad k = 1, \dots, N. \quad (18)$$

5. Пример решения задачи 4. Для оценки качества работы алгоритма, описанного в пункте 4, воспользуемся экспериментальными данными, приведенными в пункте 3 настоящей работы. В начале рассчитаем значения концентрации примеси q_i , $i = 1, \dots, N$, численно. Для этого решим прямую задачу (1)–(4), из которой определим значения концентрации примеси $q(t, x, y, z)$. Затем, используя соотношение (18), найдем $Q(t_k)$, $k = 1, \dots, N$ (т.е. найдем решение обратной задачи).

Результаты проведенных расчетов (их графическая визуализация) приведена на рис. 2.

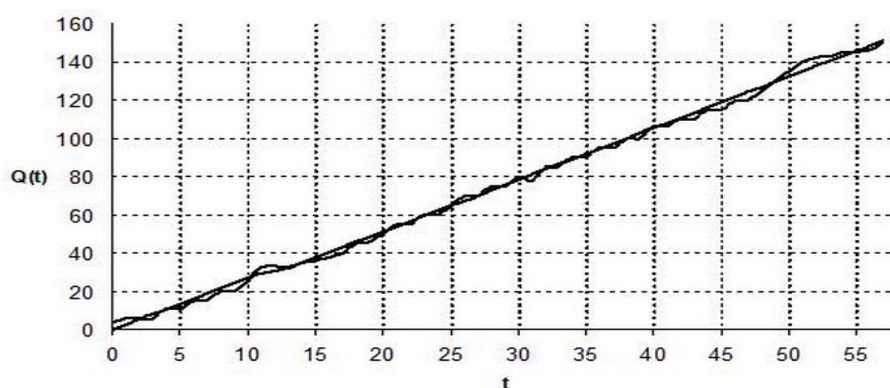


Рисунок 2 – Графическое изображение значений экспериментальной (гладкая) и расчетной (ломаная) мощностей

Сравнительный анализ проведенных расчетов с экспериментальными данными (рисунок 2) показывает, что с помощью

соотношения (18) можно восстановить значения мощности источника $Q(t_k)$ с достаточно высокой степенью точности.

6. Выводы. Основное достоинство алгоритма из п. 2 – совпадение (с малой погрешностью) расчетных и восстановленных значений мощности точечного источника почти на всем рассматриваемом интервале времени. Только в конце интервала времени наблюдения эти значения начинают заметно отличаться друг от друга. При этом этот эффект не зависит от длины интервала $(0, T)$. Основной недостаток: в случае, когда ядро интегрального уравнения (6) принимает значения меньше 10^{-4} , восстановить значения мощности осадка практически невозможно. Этот недостаток алгоритма можно устранить двумя способами: или путем масштабирования, искусственно увеличив значение ядра уравнения (6), умножая обе его части на одно и то же достаточно большое (порядка 10^4) положительное число, или проводить замеры плотности осадка на подстилающей поверхности в точке, где эта плотность достигает максимального значения.

Достоинство алгоритма, описанного в пункте 4, – незначительные расхождения значений экспериментально заданной и расчетной мощностей источника выбросов примеси на всем рассматриваемом интервале времени независимо от его длины. Основной недостаток – необходимость в априорной информации о значениях ковариации ошибок решения N и вектора φ . Добыть такую информацию на практике часто оказывается затруднительным.

Оба алгоритма (по отдельности) можно использовать в прикладных исследованиях (оба дают удовлетворительные результаты) на практике. Однако целесообразнее использовать эти алгоритмы одновременно, чтобы уменьшить вычислительные ошибки.

Список литературы

1. Семенчин Е.А. Аналитические решения краевых задач в математической модели атмосферной диффузии. Ставрополь: СКИУУ, 1993, 142 с.
2. Лоскутова Е.О. Регистрация в ФГНУ «Государственном координационном центре информационных технологий» разработки, представленной в отраслевом фонде алгоритмов и программ: Электронный комплекс программ определения количества легкой и тяжелой примеси, выпадающей на подстилающую поверхность (DODS). Номер гос. регистрации: 9293. Дата регистрации: 14.11.2007 г.
3. Бызова Н.Л., Гаргер Е.К., Иванов В.Н. Экспериментальные исследования атмосферной диффузии и расчеты рассеяния примеси. Л.: Гидрометеиздат, 1991, 278 с.
4. Лоскутова Е.О. Прямые и обратные задачи расчета количества примеси, выпадающей на подстилающую поверхность: Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. Краснодар, 2009, 26 с.
5. Годяева Е.О. (Лоскутова Е.О.), Семенчин Е.А. Обратная задача для плотности осадка, выпадающего на подстилающую поверхность от непрерывного точечного источника // Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2006. – № 12. – С. 31–34.
6. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979, 142 с.
7. Денисов А.М. Введение в теорию обратных задач. М.: Изд-во МГУ, 1994, 208 с.
8. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Лаборатория базовых знаний, 2002, 632 с.
9. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Изд-во «Наукова думка», 1986, 543 с.