С.А. Солдатенко, С.С. Суворов, О.М. Соболевский, В.С. Комаров

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ИСТОЧНИКОВ ПРИМЕСИ В АТМОСФЕРЕ

Предложен метод решения обратной задачи определения положения, количества, интенсивности и типа источников примеси, основанный на использовании уравнения, сопряженного с полуэмпирическим уравнением турбулентной диффузии. Рассматриваются стационарные точечные источники импульсного и непрерывного типов. Приведены результаты качественного анализа модели распространения примеси.

Вопрос об идентификации параметров и количества источников аэрозольного загрязнения атмосферы по результатам измерений созданной ими концентрации примеси представляет интерес для решения многих научных и практических задач, в частности при рассмотрении проблемы экологического контроля. В ряде работ (см., например, [1, 2]) рассматривается задача об определении положения и интенсивности одного непрерывно действующего источника. Вместе с тем многообразие вариантов реализации процесса загрязнения не исчерпывается только этим случаем. В данной статье рассматривается задача об идентификации примеси при отсутствии априорной информации о местоположении, типе, количестве и интенсивности источников, что является типичной ситуацией при оценивании степени антропогенной нагрузки на природоохранную территорию.

Введем в рассмотрение некоторую пространственно-временную область Ω х Ω_t . Обозначим функцию распределения концентрации примеси как $\phi(\mathbf{x}, t)$, а функцию, описывающую источники, как $f(\mathbf{x}, t)$, где $\mathbf{x} \in \Omega$ и $t \in \Omega_t$. Введем в Ω декартову систему координат. Обозначив оператор, отвечающий за распространение примеси, через L, запишем основную модель в виде

$$L \varphi = f, \tag{1}$$

гле

$$L = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \operatorname{grad} - \operatorname{div} \mu \operatorname{grad} - \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial}{\partial z}$$
 (2)

Начальные и граничные условия сформулируем следующим образом:

$$\phi=0$$
 при $t=0$; $\phi=0$ на Ψ при $\mathbf{u}_n<0$; $\frac{\partial \phi}{\partial n}=0$ на Ψ при $\mathbf{u}_n\geq 0$,

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = \alpha \, \phi + M \, \text{ на } \, \Psi_0 \; ; \; \frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \, \text{ на } \, \Psi_H \; ; \; w = 0 \, \text{ при } z = 0 \, \text{ и} \, z = H \, ,$$

где $\mathbf{u} = (u, v, w)$ и u, v, w – компоненты скорости по осям x, y, z соответственно; Ψ, Ψ_0, Ψ_H – границы Ω ; α – коэффициент захвата примеси поверхностью; μ, ν – горизонтальный и вертикальный коэффициенты диффузии; M – поверхностный источник примеси.

Процессы седиментации и самоиндуцированного подъема учтем в вертикальной компоненте скорости w (как это сделано в [3]). Для определенности будем считать, что примесь монодисперсна и инертна. Рассмотрим практически значимые случаи, когда в Ω размещены стационарные точечные или импульсные источники. Для формального описания одного точечного источника используем δ -функцию [4]. Тогда для импульсного источника имеем

$$f(\mathbf{x}, t) = Q \,\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\xi}) \,\delta(t - t_{\xi}) \,, \tag{3}$$

а для непрерывного -

$$f(\mathbf{x},t) = Q(t) \,\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\xi}) \,. \tag{4}$$

В выражениях (3) и (4) Q – интенсивность выброса; \mathbf{x}_{ξ} – координаты источника и t_{ξ} – время существования источника. Положим, что интенсивность непрерывного источника постоянна во времени, т.е. Q = const.

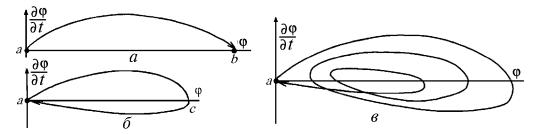


Рис. 1. Траектории для уравнения (I) при непрерывном (a), импульсном (δ) и нескольких импульсных (s) источниках примеси

Теперь исследуем особенности эволюции поля примеси в Ω при различных типах источников, соответствующих правой части в (1) в виде (3) или (4). Следует отметить, что (1) описывает систему с распределенными параметрами, т.е. ее фазовый портрет имеет бесконечную размерность. Следуя подходу, изложенному в [5], были получены фазовые портреты, представленные на рис. 1. При непрерывном источнике (рис. 1, a) наблюдается гетероклиническая траектория и, соответственно, решение имеет вид бегущей волны типа фронта. При одном импульсном источнике (рис. 1, a) получена гомоклиническая траектория и решение типа импульса. Наличие нескольких непрерывных источников качественно не меняет поведение системы. Однако следует отметить, что при нескольких импульсных источниках наблюдается возникновение периодической траектории из гомоклинной петли (рис. 1, a). Таким образом, учитывая, что особые точки a и b соответствуют стационарному решению уравнения (1), можно сделать некоторые выводы:

- анализ динамики изменения $\partial \phi / \partial t$ может быть положен в основу определения типа источника;
- идентификацию непрерывных источников желательно осуществлять по истечении переходного периода, т.е. при наступлении стационарного режима;
- неопределенность количества импульсных источников, в отличие от непрерывных, может быть снята анализом поля φ на количество максимумов (точка c).

Для решения обратной задачи используем сопряженную модель

$$L^* \varphi^* = f^* \tag{5}$$

с начальными и граничными условиями:

$$\phi^*=0 \text{ при } t=T \;,\;\; \phi^*=0 \text{ на } \Psi \text{ при } \mathbf{u}_n<0 \;;$$

$$\mu\frac{\partial \phi^*}{\partial n}+\mathbf{u}_n\phi^*=0 \text{ на } \Psi \text{ при } \mathbf{u}_n\geq 0 \;;\; \frac{\partial \phi^*}{\partial z}=\alpha \,\phi+M \text{ на } \Psi_0 \;,$$

$$\frac{\partial \phi^*}{\partial z}=0 \text{ на } \Psi_H \;; \;\; w=0 \text{ при } z=0 \text{ и } z=H \;.$$

Оператор L^* , сопряженный оператору L основной задачи (1), может быть получен на основании тождества Лагранжа [6]:

$$(\varphi^*, L\varphi) = (\varphi, L^*\varphi^*) \tag{6}$$

и имеет вил

$$L^* = -\frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{u} \operatorname{grad} - \operatorname{div} \mu \operatorname{grad} - \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial}{\partial z}.$$
 (7)

С учетом (1) и (5) выражение (6) можно привести к виду

$$(\varphi^*, f) = (\varphi, f^*)$$
. (8)

Обозначим функции Грина основного и сопряженного операторов как $G_{\xi}(\mathbf{x},t)$ и $G^*_{r}(\mathbf{x},t^*)$ соответственно (индексы ξ и r соответствуют координатам источника \mathbf{x}_{ξ} и точки измерений концентрации \mathbf{x}_{r}). По определению функции $G_{\xi}(\mathbf{x},t)$ и $G^*_{r}(\mathbf{x},t^*)$ могут быть получены при решении (2) и (5) с правыми частями в виде (3) или (4) при источнике единичной интенсивности (для G^*_{r} , \mathbf{x}_{ξ} заменяется на \mathbf{x}_{r}). Тогда, используя (8), можно получить

$$(G_r^*(\mathbf{x}, t^*), \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\xi})) = (G_{\xi}(\mathbf{x}, t), \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{r})).$$

Отсюда

$$G_r^*(\mathbf{x}_{\xi}, t^*) = G_{\xi}(\mathbf{x}_{r}, t) \tag{9}$$

при $t^*=t$. Взаимность функций Грина основного и сопряженного операторов положена в основу решения задачи идентификации. Требование $t^*=t$ является не слишком обременительным при определении параметров непрерывных источников, если система находится в стационарном режиме (точка b на рис. 1, a), однако существенно усложняет решение задачи в случае импульсных источников.

Теперь, используя $G_{\xi}(\mathbf{x},t)$, представим решение основной модели (1) в точке $\mathbf{x}\in\Omega$ для каждого точечного источника вида (3) или (4) с координатами \mathbf{x}_{ξ} и интенсивностью Q_{ξ} следующим образом:

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = Q_{\xi} G_{\xi}(\mathbf{x}, t) . \tag{10}$$

Записав решение (1) в виде (10) для точки источника \mathbf{x}_{ξ} и произвольно выбранной точки с координатами \mathbf{x}_{z} , после некоторых преобразований получим

$$\varphi(\mathbf{x}_{\xi}, t) / [G_{\xi}(\mathbf{x}_{r}, t)] = Q_{\xi} R_{\xi}(\mathbf{x}_{r}, t), \qquad (11)$$

где $R_{\xi} = G_{\xi}(\mathbf{x}_{\xi},t) / G_{\xi}(\mathbf{x}_{r},t)$ характеризует изменение чувствительности решения. Таким образом, для создания концентрации $\phi(\mathbf{x}_{\xi},t)$ интенсивность источника, при его перемещении в точку \mathbf{x}_{r} , должна быть увеличена на $R_{\xi}(\mathbf{x}_{r},t)$. Учитывая (9) и обобщив (11) на всю область Ω , введем функцию необходимой интенсивности S

$$S_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t) = \varphi(\mathbf{x}_{\mathbf{x}}, t) / G_{\mathbf{x}}^*(\mathbf{x}, t^*), \tag{12}$$

которая определяет зависимость необходимой (для создания измеренной в точке \mathbf{x}_{r} концентрации ϕ) интенсивности источника как функцию от его координат \mathbf{x} . Иными словами, если известно (измерено) $\phi(\mathbf{x}_{r},t)$, то $S_{r}(\mathbf{x},t)$ представляет собой интенсивность фиктивного источника в точке \mathbf{x} , создающего эту концентрацию.

Используя (12), обсудим проблему существования решения обратной задачи. Для этого рассмотрим, для наглядности в одномерном случае, выражение

$$S_{rl}(x_o) = S_{rl}(x_b) , \qquad (13)$$

где индексами r1 и r2 отмечено соответствие точкам проведения измерений с координатами x_{r1} и $x_{r2}, x_a \in \Omega, x_b \in \Omega$, а знак t опущен в предположении, что рассматривается стационарный режим. С учетом (12) и (10) выражение (13) примет вид

$$G_{\xi}(x_{r}) / G_{r}^{*}(x_{a}) = G_{\xi}(x_{r}) / G_{r}^{*}(x_{b}).$$
 (14)

Из (9) следует, что существует, как минимум, одна точка с координатой $x_a = x_b = x_{\varepsilon}$, где выполняется (14).

Теперь, исходя из качественного отличия механизмов формирования поля примеси при импульсных и непрерывных источниках, рассмотрим алгоритмы решения обратной задачи для разных типов источников отдельно. В случае одного непрерывного источника решение сводится к нахождению точки $\mathbf{x}(\mathbf{x} = \mathbf{x}_{\sharp})$, для которой

$$S_{r_1}(\mathbf{x}) = S_{r_2}(\mathbf{x}) = \dots = S_{r_n}(\mathbf{x}),$$
 (15)

где n – необходимое количество точек измерения концентрации примеси, соответствующее количеству искомых значений. В частности, для плоского случая, если точки измерений расположены на оси факела (т.е. задача одномерна) определение точки, удовлетворяющей условию (15), может быть сведено к минимизации функционала следующего вида:

$$\arg\min (S_{r_1}(\mathbf{x}) - S_{r_1}(\mathbf{x}))^2, \quad \mathbf{x} \in \Omega.$$

Вид необходимого функционала зависит от размерности решаемой задачи. После определения координат источника – \mathbf{x}_{ε} его интенсивность находится из соотношения (12).

При наличии p непрерывных источников определение их параметров в общем виде сводится к решению системы уравнений:

$$GQ = F. (16)$$

Элементами матрицы G являются: $g_{ij} = G_{ri}^*(\mathbf{x}_{\xi j})$ и $Q = [Q_1, \dots, Q_p]^\mathsf{T}$, $\mathbf{F} = [\phi_{r1}, \dots, \phi_{rn}]^\mathsf{T}$, i = 1(1) n, j = 1(1) p, $\mathbf{x}_{\varepsilon_i}$ – координаты j источника и ϕ_{r_i} – результаты измерения в i точке. Обозначим вклад от j источника как φ^j , тогда, после некоторых преобразований, (16) может быть приведена к следующему виду:

$$G'Q' = \varphi_{r1}, \qquad (17)$$

где элементы матриц G' и Q' представлены как

$$g_{ij}' = \left(\frac{S_{r1}(\mathbf{x}_{\xi_j})}{S_{ri}(\mathbf{x}_{\xi_j})} - \frac{S_{r1}(\mathbf{x}_{\xi_p})}{S_{ri}(\mathbf{x}_{\xi_p})}\right), \quad q_{ij}' = \phi_{r1}^j \left(1 - \frac{S_{r1}(\mathbf{x}_{\xi_p})}{S_{ri}(\mathbf{x}_{\xi_p})}\right)^{-1}, \quad i = 2(1) \ n \ , \\ j = 1(1) \ p - 1 \ .$$

После решения (17) относительно \mathbf{x}_{ξ_j} и ϕ_{r1}^j интенсивность источников находится из (12) путем замены φ на φ_{r1}^{j} . Величина φ_{r1}^{p} определяется исходя из принципа суперпозиции решений. Некоторое <усложнение> элементов матриц Q и G компенсируется уменьшением размерности и возможностью выявить источник, дающий максимальный вклад в значение концентрации.

При идентификации импульсных источников возникает проблема, связанная с неопределенностью времени выбросов (соответственно, и времени интегрирования сопряженной задачи). По аналогии со случаем непрерывных источников введем функцию необходимой интенсивности импульсного источника S'. Предположим, что в момент t_{ε} в точке \mathbf{x}_{ε} произведен выброс примеси интенсивности Q. Начиная с некоторого момента $T_{r0}(T_{r0}=t_{\xi}+\tau,\ \tau\geq0)$ через времени Δ_t в моменты времени T_{rk} $(k=0(1)\ l,$ равноотстоящие интервалы $T_{rk} = T_{r0} + k\Delta_t = t_\varepsilon + \tau + k\Delta_t$) определены координаты \mathbf{x}_{rk}^m и значения максимума поля ϕ (точка c на рис. 1, б), которые обозначим как ϕ_{rk}^{m} ($\phi_{rk}^{m} = \phi(\mathbf{x}_{rk}^{m})$). Тогда

$$S'(t^*) = \varphi_{rk}^m / G_{rk}^{*m}(t^*), \quad t^* \in [T_{rk}, 0], \tag{18}$$

996

где $G_{rk}^{*m}(t^*)$ – максимум фундаментального решения задачи (5). Теперь рассмотрим идентификацию одного импульсного источника. Для каждого момента T_{rk} построим функцию (18), тогда определение времени выброса t_{ε} сведется к нахождению времен t_{rk}^* , при которых

$$S'_{r0}(t_{r0}^*) = S'_{r1}(t_{r1}^*) = \dots = S'_{r1}(t_{r1}^*) \tag{19}$$

учитывая, что $t_{\xi} = T_{rk} - t_{rk}^*$. Координаты источника \mathbf{x}_{ξ} представляют максимум функции G_{rk}^* при интегрировании задачи (5) на время $T_{rk} - t_{rk}^*$, а интенсивность Q может быть найдена из (18). Идентификация $p(\ p>1)$ импульсных источников в общем случае сводится к решению системы уравнений (16), где для некоторого момента времени T_{rk} соответствующие элементы матриц имеют вид

$$\begin{split} g_{ij} &= G_{\xi_j}(\mathbf{x}^{mi}, \ T_{rk}) \ ; \quad Q = [Q_1, \dots, Q_p]^{\mathrm{T}} \ ; \\ F &= [\phi_{rk}^{\ m1}, \dots, \phi_{rk}^{\ mp}]^{\mathrm{T}} \ \text{if} \ i = 1(1) \ p \ j = 1(1) \ p \ . \end{split}$$

Положим, что по-прежнему интервалы измерений равноотстоят по времени на Δ_i , и обозначим τ_j – интервал между временем выброса j источником и началом проведения измерений поля ϕ : $\tau_j = T_{r0} - t_{\xi_j}$. Аналогично случаю одного импульсного источника определим в момент T_{rk} положение \mathbf{x}_{rk}^{mj} и значение ϕ_{rk}^{mj} каждого j максимума поля ϕ : $\phi_{rk}^{mj} = \phi(\mathbf{x}_{rk}^{mj}, T_{rk})$. Тогда, для любого i-го максимума выполняется:

$$\phi_{rk}^{mi} = Q_i G_{rk}^{*mi}(\tau_i + k\Delta_i) + \sum_{j=1}^{p} Q_j G_{rk}^{*i}(\mathbf{x}_{\xi_j}, \tau_j + k\Delta_i), j \neq i.$$
(20)

В выражении (20) в правой части первое слагаемое определяет вклад в i-й максимум поля ϕ от i-го источника, второе слагаемое — вклад от остальных p-1 источников, j приобретает значения номеров всех источников за исключением i, а G_{rk}^{*i} — решение задачи (5) с правой частью в виде f= $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{rk}^{mi})$ $\delta(t-T_{rk})$. Если второе слагаемое в правой части (20) мало и им можно пренебречь, идентификация p импульсных источников сведется \mathbf{x} использованию процедуры определения параметров одного источника \mathbf{x} каждому из \mathbf{p} максимумов поля $\mathbf{\phi}$. Эта ситуация наблюдается при <разнесенных> во времени или (и) пространстве источниках \mathbf{x} и качественно характеризуется фазовым портретом — рис. 1, $\mathbf{\delta}$ (т.е. отображающая точка возвращается \mathbf{x} пожение равновесия \mathbf{a}). В противном случае поведение системы характеризуется рис. 1, \mathbf{e} , т.е. существованием предельного цикла. Тогда идентификация \mathbf{p} импульсных источников сведется \mathbf{x} решению системы уравнений:

$$GQ = F^m, (21)$$

где элементы матрицы G имеют вид

$$\begin{split} g_{kj} &= G_{rk}^{*j}(\mathbf{x}_{\xi,j},\,\tau_j + k\,\Delta_l) \text{ при } j \neq 1 \ , \\ g_{k1} &= G_{rk}^{*mj}(\tau_j + k\,\Delta_l) \ ; \quad \mathcal{Q} = [\mathcal{Q}_1,\,...,\,\mathcal{Q}_p]^{\mathrm{T}} \ ; \\ F^m &= [\phi_{r1}^{m1},\,...,\,\phi_{rn}^{m1}]^{\mathrm{T}} \ k = 0(1) \ l \ , j = 1(1) \ p \ . \end{split}$$

Поскольку априори количество источников неизвестно, возникает задача выбора необходимого алгоритма. Для ее решения на первом шаге в некоторой точке \mathbf{x}_r анализируется $\partial \phi / \partial t$ и определяется тип источника. Возможны два случая: наличие непрерывных источников (рис. 1, a) и импульсных источников (рис. a). В первом случае выдвигается гипотеза о наличии только одного источника и осуществляется определение его параметров (по (15) и (12)), используя результаты измерения концентрации в двух разных группах точек. Полученные решения сравниваются. При их попадании в интервал неопределенности идентификация

считается завершенной. В противном случае принимается гипотеза о наличии нескольких источников. Количество искомых источников увеличивается на единицу и решается система уравнений (17) для измерений в двух группах точек. Увеличение числа искомых источников происходит до тех пор, пока решения не попадут в интервал неопределенности у. Например, по результатам численных экспериментов получено, что для интенсивности источника выражение для интервала неопределенности имеет вид

$$\gamma_0 = \chi \phi + 0.44 \xi v + 0.69 \xi \mu$$
,

где χ_s — относительная ошибка задания элемента s. При обнаружении импульсных источников неопределенность их количества снимается анализом поля ϕ на количество максимумов p. При p>1 необходимо оценить величину второго слагаемого в правой части (20), основываясь либо на имеющейся априорной информации, либо на анализе $\partial \phi / \partial t$, и использовать подход, основанный на (19) (один источник или источники уравнеены>), или решать систему уравнений (21).

Реализация процедуры идентификации сводится к расщеплению оператора сопряженной (5) модели по процессам и координатам [7] и разностной аппроксимации полученных операторов. Отметим, что в задачах идентификации источников примеси особое внимание должно быть уделено численной реализации шага адвекции, что обусловлено наличием разрывов у функции ф, вызванных влиянием точечных источников примеси.

На основании серии численных экспериментов с распространенными при решении аналогичных задач схемами (Мак-Кормика, Лакса—Вен-дроффа, FCT, TVD) можно сделать вывод, что наилучшее приближение точного решения на всем интервале и в районе точек разрыва (из рассмотренных схем) дает явная схема TVD. Для согласования интервалов дискретизации по времени и пространству следует использовать неявную схему, например, Кранка—Николсона. Решение (15), (17), (19) и (21) осуществляется с использованием стандартных процедур [8, 9].

По результатам численных экспериментов получено, что ошибка аппроксимации операторов (2) и (6) при расщеплении составляет менее 1%. Для статистической оценки качества определения положения и интенсивности источников проводилась серия численных экспериментов на примере пос. Сиверский Ленинградской обл. На объеме выборки в 10000 измерений концентрации примеси получено, что, например, для одного непрерывного источника с интенсивностью Q = 5 г/c доверительные границы (P = 0.95) составляют 660 м, 270 м и 0.6 г/c для x, y и Q соответственно.

- 1. К р ы л о в а $\ A$. И . , $\ P$ а п у т а $\ B$. Φ . //Метеорология и гидрология. 1993. N 5. C. 29–35.
- 2. Пененко В.В., Рапута В.Ф., Панарин А.В. // Метеорология и гидрология. 1985. N 11. C. 15–23.
- 3. Солдатенко С.А., Соболевский О.М. // Оптика атмосферы и океана. 1994. Т. 7. N 2. С. 213–222.
- 4. Берлянд М.Е. // Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометео-издат, 1957. 250 с.
- 5. Холодниок М., Клич А. и др. Методы анализа нелинейных динамических моделей. М.: Мир, 1991. 365 с.
- 6. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 319 с.
- 7. Марчук Г.И. Методы расщепления. М.: Наука, 1988. 263 с.
- 8. А м о с о в $\,$ А . А . , $\,$ Д у б и н с к и й $\,$ и др. Вычислительные методы для инженеров. М.: Высшая школа, 1994. 544 с.
- 9. Бахвалов Н.С. Численные методы. Т. 1. М.: Наука, 1975. 631 с.

Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск Поступила в редакцию Военная инженерно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург 16 января 1995 г.

 $S.A.\ Soldatenko,\ S.S.Suvorov,\ O.M.\ Sobolevskii,\ V.S.\ Komarov.\ \textbf{Identification of Atmospheric Impurity Sources.}$

A method is proposed in the paper for solution of the inverse problem of determining the location, quantity, power, and type of impurity sources based on use of an equation conjugated to semiempirical equation of turbulent diffusion. Stationary point sources of pulse and continuous types are treated. The results of qualitative analysis of an impurity transfer model are presented.