

## Определение городских районов-загрязнителей атмосферного воздуха по данным наблюдений

Е.А. Панасенко, А.В. Старченко\*

Томский государственный университет  
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

Поступила в редакцию 18.03.2008 г.

Рассматриваются обратные задачи, в которых по данным измерений определяются источники загрязнения городского воздуха. Излагается постановка задачи, обсуждаются алгоритмы решения задач и используемые разностные схемы численного решения уравнений. Кроме того, представлена модификация метода Г.И. Марчука для решения обратных задач, позволяющая с помощью многопроцессорных вычислительных систем определять городские районы с наибольшей интенсивностью выбросов вредных веществ. Даны примеры применения рассмотренного подхода для условий г. Томска.

*Ключевые слова:* задача переноса примеси, обратная задача, математическое моделирование, адвективно-диффузионное уравнение, разностная схема, параллельная реализация.

Проблема охраны окружающей среды в настоящее время становится одной из важнейших задач науки. Это связано с интенсивным развитием промышленности, которое приводит к увеличению доли вредных выбросов, загрязняющих окружающую среду [1]. Одним из способов регулирования уровня загрязнения атмосферного воздуха является контроль интенсивности выброса вредных веществ. Однако даже разветвленная сеть наземных постов наблюдений не всегда в полной мере способна предоставить необходимую для природоохранных служб информацию. Большую помощь здесь может оказать применение методов математического моделирования и, особенно, технологий численного решения обратных задач по определению характеристик источников загрязнения атмосферного воздуха по данным измерений концентраций вредных веществ [1, 2].

Целями данной работы являются построение для суперкомпьютерной вычислительной техники алгоритмов решения обратных задач охраны окружающей среды методом, опирающимся на использование сопряженных уравнений переноса и диффузии субстанции [1], и применение созданных алгоритмов для решения реальных задач определения городских районов-загрязнителей атмосферного воздуха по данным наблюдений.

### Физическая постановка задачи

Требуется по известным метеорологическим параметрам атмосферы, свойствам подстилающей по-

верхности и результатам измерений концентрации примеси в  $N$  точках, проводимых в течение некоторого периода времени  $T$ , определить районы города с наибольшей интенсивностью выброса вредных веществ. Задача такого рода чрезвычайно актуальна для создания автоматизированной системы контроля экологической обстановки в крупных городах. На рис. 1 на примере города Томска проиллюстрирован рассматриваемый подход.

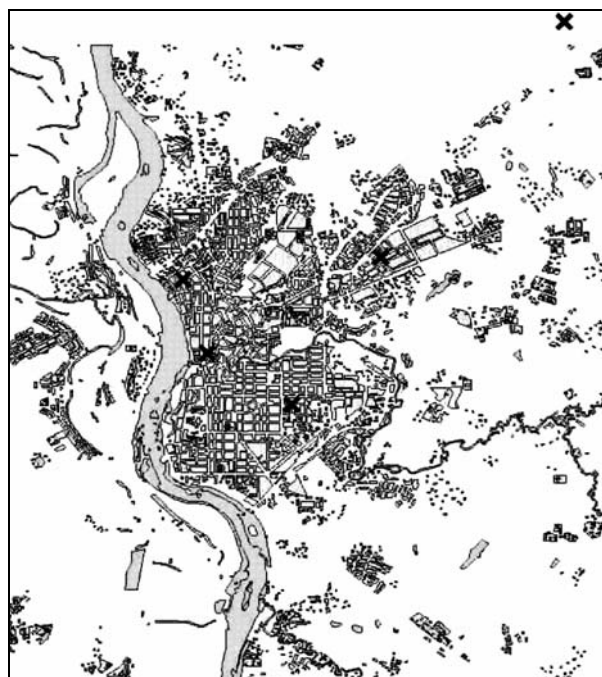


Рис. 1. Карта города Томска с указанием расположения пунктов измерения концентрации примеси (X)

\* Елена Александровна Панасенко (ea@math.tsu.ru); Александр Васильевич Старченко (starch@math.tsu.ru).

## Математическая постановка обратной задачи

Для решения рассматриваемой задачи используется метод, который основан на решении уравнения, сопряженного с полуэмпирическим уравнением турбулентной диффузии, и двойственным представлением функционала от концентрации примеси [1].

В случае выбора эйлерова подхода [1, 2] моделирование процессов переноса и диффузии примеси выполняется с использованием трехмерного нестационарного уравнения «адвекции-диффузии»:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial UC}{\partial x} + \frac{\partial VC}{\partial y} + \frac{\partial WC}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + Q, \quad t > 0, \quad (1) \end{aligned}$$

где  $C$  – концентрация примеси;  $U$ ,  $V$ ,  $W$  – компоненты соленоидального вектора скорости потока;  $\Gamma$ ,  $K_z$  – коэффициенты турбулентной диффузии;  $Q$  – интенсивность выбросов источников примеси.

Начальные и граничные условия для уравнения (1) имеют вид [1, 2]:

$$\begin{aligned} t = 0: \quad & C(t, x, y, z) = C_0(x, y, z); \\ x = 0: \quad & \frac{\partial C}{\partial x} = 0; \quad x = L_x: \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0; \\ y = 0: \quad & \frac{\partial C}{\partial y} = 0; \quad y = L_y: \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0; \\ z = 0: \quad & K_z \frac{\partial C}{\partial z} = \sigma C; \quad z = L_z: \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  – размеры области исследования;  $\sigma$  – скорость осаждения примеси [3, 4]:

$$\sigma = \frac{1}{r_a + r_b + r_c}, \quad r_a = \frac{\Psi(z/z_0, z/L)}{\kappa v_*}, \quad r_b = \frac{2(Sc/0,72)^{2/3}}{\kappa v_*},$$

$$\Psi(z/z_0, z/L) = \begin{cases} \ln(z/z_0) - 2 \ln \left( \frac{1 + \sqrt{1 - 9z/L}}{1 + \sqrt{1 - 9z_0/L}} \right), & z/L \leq 0, \\ \ln(z/z_0) + 6,34(z/L - z_0/L), & z/L > 0, \end{cases}$$

где  $r_a$  – аэродинамическое сопротивление турбулентной атмосферы элементам топографии поверхности;  $r_b$  – сопротивление ламинарного подслоя элементам шероховатости поверхности;  $r_c$  – сопротивление, обусловленное растительностью [4, 5];  $z_0$  – высота шероховатости;  $L$  – масштаб Обухова;  $Sc$  – число Шмидта;  $\kappa = 0,41$  – постоянная фон Кармана;  $v_*$  – динамическая скорость.

Сопряженная постановка задачи получается с использованием (1) и (2). Для этого уравнение (1) умножается на некоторую функцию  $C^*(t, x, y, z)$  и интегрируется по времени и пространству:

$$\int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* \frac{\partial C}{\partial t} dz dy dx dt + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* U \frac{\partial C}{\partial x} dz dy dx dt +$$

$$\begin{aligned} & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* V \frac{\partial C}{\partial y} dz dy dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* W \frac{\partial C}{\partial z} dz dy dx dt = \\ & = \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right) dz dy dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right) dz dy dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) dz dy dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* Q dz dy dx dt. \end{aligned}$$

Используя формулы интегрирования по частям, приходим к уравнению

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C \left[ -\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial(UC^*)}{\partial x} - \frac{\partial(VC^*)}{\partial y} - \frac{\partial(WC^*)}{\partial z} - \right. \\ & \left. - \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C^*}{\partial z} \right) \right] dz dy dx dt = \\ & = - \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} C C^* \Big|_0^{L_z} dz dy dx - \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} U C^* C \Big|_0^{L_x} dz dy dt - \\ & - \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} V C^* C \Big|_0^{L_y} dz dx dt - \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} W C^* C \Big|_0^{L_z} dy dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \Gamma C^* \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_0^{L_x} dz dy dt - \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \Gamma C \frac{\partial C^*}{\partial x} \Big|_0^{L_x} dz dy dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \Gamma C^* \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_0^{L_y} dz dx dt - \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \Gamma C \frac{\partial C^*}{\partial y} \Big|_0^{L_y} dz dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} K_z C^* \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_0^{L_z} dy dx dt - \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} K_z C \frac{\partial C^*}{\partial z} \Big|_0^{L_z} dy dx dt + \\ & + \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* Q dz dy dx dt. \end{aligned} \quad (3)$$

Предположим, что  $C^*$  удовлетворяет уравнениям

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial UC^*}{\partial x} - \frac{\partial VC^*}{\partial y} - \frac{\partial WC^*}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} - \\ & - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial C^*}{\partial z} = P_k; \quad k = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (4)$$

с соответствующими начальными и граничными условиями (предполагается, что  $W = 0$  при  $z = 0$  и  $z = L_z$ ):

$$\begin{aligned}
& C^*(T, x, y, z) = 0; \\
& x = 0 : UC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} = 0, \quad x = L_x : UC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial x} = 0; \\
& y = 0 : VC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} = 0, \quad y = L_y : VC^* + \Gamma \frac{\partial C^*}{\partial y} = 0; \\
& z = 0 : K_z \frac{\partial C^*}{\partial z} = \sigma C^*, \quad z = L_z : \frac{\partial C^*}{\partial z} = 0, \quad (5)
\end{aligned}$$

где  $P_k = \delta(x - x_k)\delta(y - y_k)\delta(z - z_k)\delta(t - t_k)$ ,  $k = 1, \dots, N$ ;  $\delta()$  — дельта-функция;  $N$  — количество измерений концентрации  $C(t, x, y, z)$  в точках с координатами  $(x_k, y_k, z_k)$  в момент времени  $t_k$ . Здесь предполагаем, что  $t_k \gg 0$  настолько, что справедливым является допущение

$$C^*(0, x, y, z) = 0. \quad (6)$$

С учетом (4)–(6) из (3) получаем

$$\begin{aligned}
\int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} CP_k dz dy dx dt = \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C_k^* Q dz dy dx dt; \\
k = 1, \dots, N,
\end{aligned}$$

где  $C_k^*$  — решение  $k$ -й сопряженной задачи (4), (5) с правой частью  $P_k$ . Вследствие принятого вида функции  $P_k$  последнее равенство переписывается как

$$\int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^* Q dz dy dx dt = C_k; \quad k = 1, \dots, N \quad (7)$$

и может рассматриваться в качестве двойственного представления функционала от концентрации примеси или некоторых дополнительных соотношений для оценки распределения и интенсивности городских источников выброса примеси в приземный слой воздуха по измеренным значениям концентрации примеси  $C_k$  в точках с координатами  $(x_k, y_k, z_k)$  в момент времени  $t_k$ .

## Численное решение обратной задачи

В силу сложной зависимости метеорологических параметров атмосферного пограничного слоя от времени и координат сопряженные задачи (4), (5) могут быть решены только численно. Их решение строится на основе метода конечного объема [6], представляющего область исследования в виде совокупности непересекающихся параллелепипедов (конечных объемов), причем их размеры по горизонтали выбираются одинаковыми, а по вертикали — переменными со сгущением при приближении к подстилающей поверхности.

При разностной аппроксимации (4), (5) использовались разностные схемы со вторым порядком точности по координатам и первым — по времени. Для адвективных членов уравнений (4) применялась схема Ботта [7]. Выбранный подход для численного интегрирования сопряженной задачи (4), (5) проверялся на аналитическом решении для источника

примеси с постоянной интенсивностью и мгновенного точечного источника [1, 8].

Поскольку решение  $N$  сопряженных задач (4), (5) предполагалось проводить на сетке с количеством конечных объемов  $100 \times 100 \times 60$  (горизонтальный шаг сетки составил 500 м) в течение 2 сут периода моделирования физических процессов, для ускорения получения результата был разработан параллельный алгоритм решения сопряженных задач (4), (5), опирающийся на одномерную декомпозицию сеточной области [9]. Этот алгоритм показал высокую эффективность параллельной программы на кластере ТГУ СКИФ Cyberia (<http://skif.tsu.ru>), причем ускорение общего вычислительного процесса было увеличено еще и за счет одновременного решения  $N$  сопряженных задач (4), (5), интегрирование которых можно проводить независимо, что позволяет огромные ресурсы этой многопроцессорной кластерной системы. Так, при решении конкретных задач по определению основных районов-загрязнителей атмосферного воздуха в г. Томске вычисления проводились одновременно на 600 ядрах системы в течение 4 мин, что существенно меньше временных затрат при решении этих задач на однопроцессорной системе с аналогичными характеристиками — 30 ч процессорного времени.

Результаты решения сопряженных задач затем использовались в (7) для оценки распределения и интенсивности источников выброса примеси

$$\bar{Q}(x, y) = \frac{\int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^*(t, x, y, z) Q(t, x, y, z) dt dz}{\int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} C^*(t, x, y, z) dt dz}.$$

При этом предполагается (рис. 2), что

$$\begin{aligned}
& \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} \int_0^T C_k^*(t, x, y, z) Q(t, x, y, z) dt dz dy dx = \\
& = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \left[ \int_0^T \int_0^{L_z} C_k^* dt dz \right] \bar{Q}(x, y) dy dx \approx \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} a_{i,j}^k \bar{Q}_{i,j} S_{i,j},
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
a_{i,j}^k &= \int_0^T \int_0^{L_z} C_k^*(t, x_i, y_j, z) dt dz, \quad i = 1, \dots, N_x; \quad j = 1, \dots, N_y; \\
\bar{Q}_{i,j} &\approx \bar{Q}(x_i, y_j)
\end{aligned}$$

— интенсивность источников в ячейке с номером  $(i, j)$  и площадью  $S_{i,j}$ .

Тогда условия (7) можно привести к задаче минимизации функции нескольких переменных  $\Phi(\bar{Q}_{1,1}, \bar{Q}_{1,2}, \dots, \bar{Q}_{N_x, N_y})$  с простыми ограничениями:

$$\begin{aligned}
& \Phi(\bar{Q}_{1,1}, \bar{Q}_{1,2}, \dots, \bar{Q}_{N_x, N_y}) = \\
& = \sum_{k=1}^N \left( \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} a_{i,j}^k \bar{Q}_{i,j} S_{i,j} - C_k \right)^2 \rightarrow \min, \quad (8) \\
& \bar{Q}_{i,j} \geq 0, \quad i = 1, \dots, N_x; \quad j = 1, \dots, N_y.
\end{aligned}$$

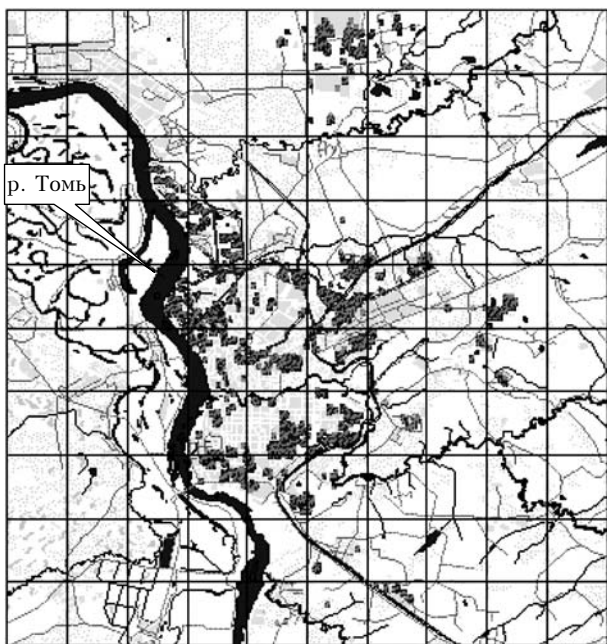


Рис. 2. Область исследования с нанесенной вычислительной сеткой

Для решения такой задачи в данном исследовании на основе сравнительного анализа соответствующих программ Библиотеки численного анализа [10], выполненных на тестовых и реальных задачах, был выбран метод сопряженных градиентов [11, 12].

## Результаты расчетов

При решении рассматриваемой задачи оценки характера распределения и интенсивности источни-

ков загрязнения атмосферного воздуха в качестве входных параметров использовались результаты измерения монооксида углерода на пяти постах наблюдения, расположенных в г. Томске (см. рис. 1). Измерения на этих постах обычно проводятся 3 раза в день (7:00, 13:00 и 19:00 местного времени). При моделировании рассматривался период времени, охватывающий 2 сут ( $T = 172\,800$  с), следовательно количество измерений  $\{C_k, k = 1, \dots, N\}$ , необходимых для решения обратной задачи, составляет  $N = 30$ . Область исследования имеет площадь размером  $50 \times 50$  км, в ее центральной части находится городская территория. Верхняя граница расчетной области располагается на высоте 2000 м. Метеорологические параметры (скорость, направление приземного ветра, турбулентные характеристики атмосферного пограничного слоя) для выбранных исторических дат рассчитывались с использованием мезомасштабной модели ТГУ–ИОА СО РАН [13].

Тестирование правильности решения обратной задачи (определения координат и интенсивности источников) проводилось с использованием результатов численного решения прямой задачи в качестве необходимых входных данных. На рис. 3 представлены изолинии интенсивности выброса примеси  $Q(x, y)$ , полученные при решении обратных задач, в которых использовались измеренные значения концентрации СО и предсказанные численно на основе (1), (2) для метеорологических условий г. Томска 7–8 сентября 2000 г. [9]. Сравнивая полученные значения  $Q(x, y)$ , следует отметить, что результаты неплохо согласуются между собой не только по характеру найденного распределения районов города, активно выбрасывающих в атмосферу СО в рассматриваемый период времени, но и по их интенсивности.

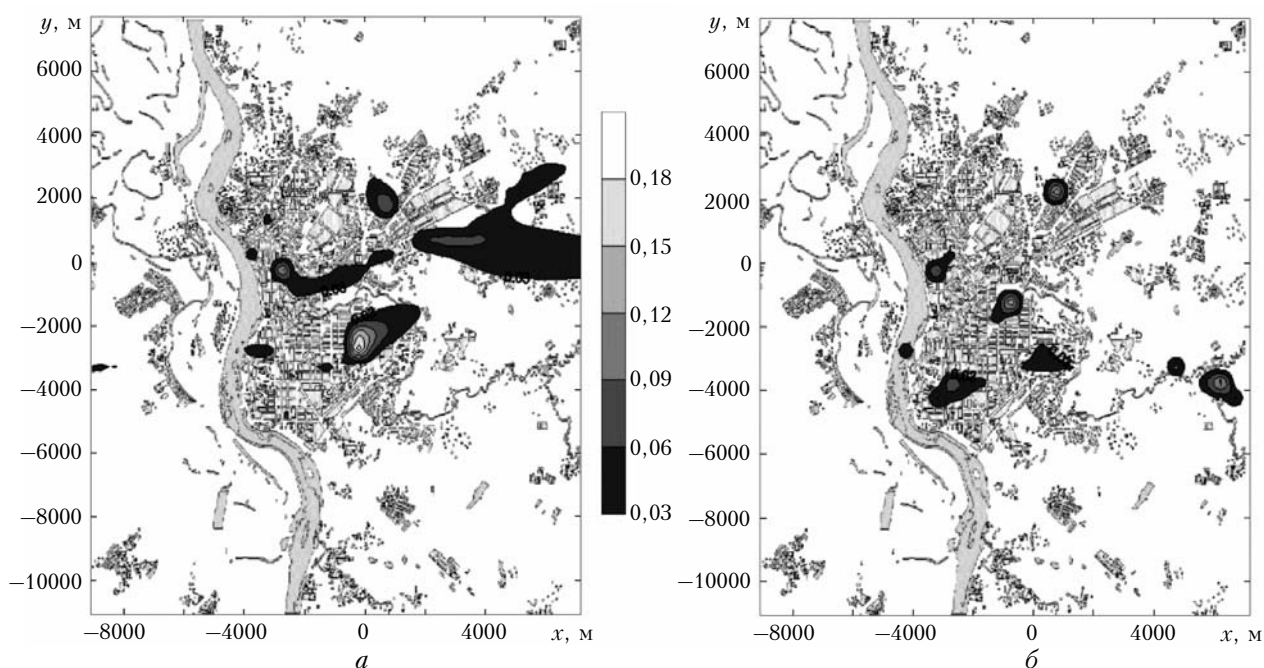


Рис. 3. Распределение наиболее значимых источников загрязнения воздуха на 7–8 сентября 2000 г. (а – решение обратной задачи по измеренным значениям монооксида углерода; б – решение обратной задачи по расчетным данным прямой задачи)

В целом предсказанная численно картина соответствует расположению основных городских районов, ответственных за выброс в атмосферу CO. Кроме того, предложенная в работе методика позволяет также достаточно надежно оценить за короткий период времени и интенсивность таких выбросов.

На рис. 4 представлены изолинии  $\bar{Q}(x, y)$ , полученные в результате обработки описи интенсивностей линейных, площадных и точечных источников выбросов монооксида углерода для г. Томска

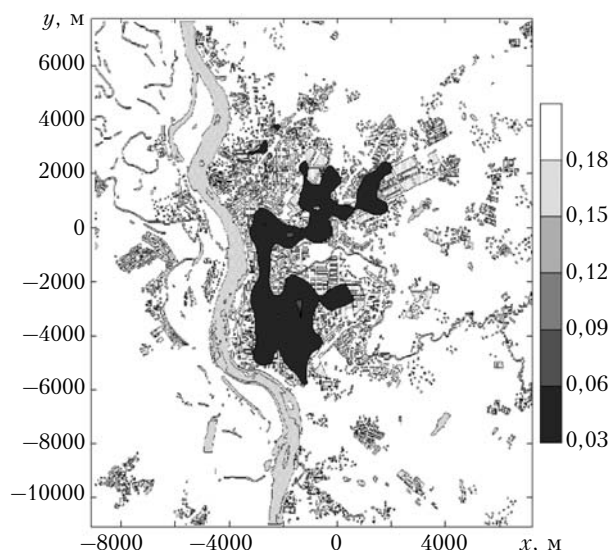


Рис. 4. Распределение наиболее значимых источников выбросов монооксида углерода в 2000 г. (использовалось в качестве входных данных для решения прямой задачи)

в 2000 г., которые использовались в качестве входных данных при численном решении задачи (1), (2) [9]. Эти результаты подтверждают достоверность предсказанных численно значений интенсивности выбросов CO.

### Заключение

В статье сформулирована математическая постановка обратной задачи по определению городских районов-источников выброса вредных веществ по измеренным значениям их концентрации. Математическая постановка опирается на аппарат сопряженных уравнений и двойственное представление функционала от концентрации примеси. Рассмотренная обратная задача решена численно с использованием конечно-разностных методов и методов многомерной оптимизации экстремальных задач с простыми ограничениями. Для ускорения численного решения задачи разработан параллельный

алгоритм, который позволяет в сотни раз быстрее получить результаты.

Рассмотренные модели и методы их численной реализации были применены для обнаружения наиболее значимых источников загрязнения атмосферного воздуха монооксидом углерода. Достоверность полученных результатов решения обратной задачи подтверждена, во-первых, результатами решения обратной задачи с использованием данных предсказания, получаемых по задаче (1)–(2) с известным распределением источников выброса, и, во-вторых, на основе анализа интенсивности источников CO в городской черте.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 07-05-01126.

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 315 с.
2. Алоян А.Е., Пененко В.В., Козодеров В.В. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. Современные проблемы вычислительной математики и математического моделирования. Т. 2 // Математическое моделирование. М.: Наука, 2005. С. 277–349.
3. Moussiopoulos N., Sahn P., Kessler C. Numerical simulation of photochemical smog formation in Athens, Greece – A case study // Atmos. Environ. 1995. V. 29. N 24. P. 3619–3632.
4. Perego S. Metphomod – a Numerical Mesoscale Model for Simulation of Regional Photosmog in Complex Terrain: Model Description and Application during Pollumet 1993 (Switzerland) // Meteorol. Atmos. Phys. 1999. V. 70. P. 43–69.
5. Hurley P.J. The Air Pollution Model (TAMP) Version 2, CSIRO Atmospheric Research Technical Paper. 2002. N 55. P. 37.
6. Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск: Изд-во ИМ СО РАН, 2000. 345 с.
7. Bott A.A. Positive definite advection scheme obtained by Nonlinear Renormalization of the Advective Fluxes // Mon. Wea. Rev. 1988. V. 117. P. 1006–1115.
8. Панасенко Е.А. Численное исследование переноса примеси в атмосфере // Третья Всерос. конф. молодых ученых «Фундаментальные проблемы новых технологий в 3-м тысячелетии». Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2006. С. 582–586.
9. Старченко А.В., Беликов Д.А. Численная модель для оперативного контроля уровня загрязнения городского воздуха // Оптика атмосфер. и океана. 2003. Т. 16. № 7. С. 657–665.
10. [http://num-anal.srcc.msu.ru/lib\\_na/libnal.htm](http://num-anal.srcc.msu.ru/lib_na/libnal.htm)
11. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 203 с.
12. Васильев Ф.П. Лекции по методам решения экстремальных задач. М.: Изд-во МГУ, 1974. 273 с.
13. Старченко А.В. Численное исследование локальных атмосферных процессов // Вычисл. техн. 2005. Т. 10. Ч. 2. С. 81–89.

*E.A. Panasenko, A.V. Starchenko. Definition of city areas-pollutants of atmospheric air by measurements.*

The inverse problems are considered in the present work and the sources of urban atmosphere pollution are defined by measurements. The statement of the problem is formulated and algorithms of the problems solution, used numerical schemes for equations are discussed. Besides the modification of G.I. Marchuk method for the solution of the inverse problems is realized which is allow with the use of multiprocessing computing systems to define city areas with the greatest intensity of emissions of harmful substances. The examples of application of the considered approach for the conditions of Tomsk are presented in this investigation.