<Оптика атмосферы и океана>, **8**, N 7 (1995)

УДК 551.510.42

В.С. Комаров, С.А. Солдатенко, С.С. Суворов

ИССЛЕДОВАНИЕ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛЕЙ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ (МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА)

Предлагается подход к исследованию чувствительности моделей переноса консервативных примесей в атмосфере, основанный на стохастическом толковании параметров модели и результатов измерений. Рассмотрена обратная задача распространения примесей и представлена методика исследования чувствительности ее решения к вариациям результатов измерения концентрации примеси, индуцированной стационарным сосредоточенным источником. Предлагаемая методика может быть обобщена на случай наличия нескольких сосредоточенных источников, работающих как в стационарном, так и в импульсном режимах.

Вопросы исследования свойств моделей переноса примесей в атмосфере имеют большое значение как с теоретической, так и с прикладной точки зрения. В первую очередь, актуальность решения такого рода вопросов обусловлена широким использованием моделей переноса примесей при решении прямых и обратных задач экологического контроля.

Под прямой задачей понимается задача определения концентрации некоторой компоненты в определенный момент времени по заданным начальным и граничным условиям, а также по известной функции интенсивности источника примеси.

Обратная задача трактуется как задача определения поля интенсивности источников примеси по известному на некоторый момент полю концентрации, индуцированному им, и некоторым граничным условиям. В зависимости от наличия априорной информации об источниках примеси, обратная задача может формулироваться как задача определения координат источников выбросов или как задача определения интенсивности этих источников. В общем случае (при отсутствии априорной информации) требуется определить обе эти характеристики.

Информация, получаемая в результате решения этих задач, используется при построении моделей социально-экономического развития регионов и проведении экологических экспертиз проектов социального развития. Естественно, что качество управленческих решений по данным вопросам во многом определяется точностью и достоверностью модельных результатов. Однако несмотря на значительное число исследований, посвященных вопросам построения и численной реализации моделей переноса примесей (см., например, обзор [1]), за рамками анализа остается рассмотрение чувствительности моделей к вариациям исходных данных, то есть обоснование степени достоверности и точности результатов.

В [2], основываясь на детерминистском подходе, получены некоторые оценки чувствительности решения обратной задачи к вариациям параметров модели. Однако ввиду того, что истинные значения параметров нам неизвестны, вариация некоторого параметра модели также не может быть определена. Следовательно, основываясь на указанном подходе, нельзя вынести конструктивные суждения о точности решения задачи. Нам представляется, что большего понимания степени чувствительности решения можно достичь при стохастической интерпретации задачи, то есть базируясь на рассмотрении параметров модели, исходных данных и результатов решения задачи как некоторых случайных величин.

В настоящей статье представлена методика исследования чувствительности решения обратной задачи переноса примесей в атмосфере для одного источника примеси, работающего в стационарном режиме.

Постановка прямой задачи. Пусть в некоторой прямоугольной области A, имеющей протяженность по координатам x и y несколько десятков километров, в точке с координатами (x_0, y_0, z_0) расположен источник примеси, обладающий функцией интенсивности $f(t)$ следующего вида:

$$f = f(t) = \begin{cases} 0, & \text{при } t < t_0 \\ Q = \text{const}, & \text{при } t \geq t_0. \end{cases} \tag{1}$$

Требуется определить концентрацию примеси c в некоторый момент времени $t > t_0$.

Для решения этой задачи используем кинематическую модель переноса примеси, предложенную в [3]. В этой модели учтены основные физические процессы, оказывающие существенное влияние на формирование поля концентрации примеси. Уравнение модели в z-системе координат записывается следующим образом:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{V}\,\text{grad}\,c - \nabla_s(\mu\,\nabla_s\,c) - \frac{\partial}{\partial z}\,\nu\,\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{\rho}\,(I_c + I_c^*) = f, \tag{2}$$

где c – удельная концентрация примеси; $\mathbf{V} = (u, v, w)$ – вектор скорости движения воздуха; μ и ν – коэффициенты турбулентной диффузии примеси по горизонтали и вертикали соответственно; I_c и I_c^* – функции, учитывающие производство и сток примеси за счет трансформационных процессов; $\nabla_s = \mathbf{i}\partial/(\partial\,x) + \mathbf{j}\partial/(\partial\,y)$.

Использование кинематической модели вполне оправдано при решении задачи о распространении консервативной примеси, то есть примеси, не оказывающей обратного влияния на термобарическую структуру атмосферы. Поэтому коэффициенты турбулентного обмена и скорость движения воздуха являются входными параметрами модели, которые могут быть определены либо по данным измерений, либо рассчитаны с использованием некоторой модели. Будем также полагать, что производство примеси осуществляется только источником, т.е. $I_c = 0$.

Нижней границей области решения является подстилающая поверхность, на которой вполне оправдана следующая формализация взаимодействия примеси с границей [4]:

$$\nu\,\left.\frac{\partial c}{\partial z}\right|_{z=0} = k_s\left(\left.c\right|_{z=0} - c_s\right) + Q_s, \tag{3}$$

где c_s – концентрация примеси над подстилающей поверхностью, обеспечивающая равновесное состояние обменного процесса; k_s – коэффициент обмена, являющийся функцией, типа почвы, характера растительного покрова и температуры; Q_s – интенсивность потока примеси от подстилающей поверхности в атмосферу.

В качестве верхней границы выбрана тропопауза. Этот выбор физически оправдан, так как тропопауза является мощным задерживающим слоем, на нижней границе которого можно поставить следующее условие [5]:

$$\left.\frac{\partial c}{\partial z}\right|_{z=z_{\text{т}}} = k_c\left(c_{\text{т}} - \left.c\right|_{z=z_{\text{т}}}\right), \tag{4}$$

где $z_{\text{т}}$ – высота тропопаузы, принимаемая в модели за 10 км; k_c – коэффициент обмена; $c_{\text{ст}}$ – равновесная концентрация примеси в стратосфере.

Боковые границы области решения являются открытыми. На них ставятся следующие грничные условия. Для части границы, где происходит приток воздуха, предполагается, что

$$c = 0, \tag{5}$$

а для части границы, где происходит отток воздуха,

$$\partial\,c\,/\,(\partial\,n) = 0, \tag{6}$$

где $\partial c/(\partial n)$ – производная от c по внешней нормали к области решения.

Начальным условием является отсутствие в атмосфере примеси, т.е.

$$c\Big|_{t=t_0} = 0. \tag{7}$$

Это условие выбрано с целью упрощения анализа процесса распространения примеси от рассматриваемого нами источника.

Параметризация описываемых функцией I_c^* процессов подсеточного масштаба, которыми в данной модели являются самоиндуцированный подъем аэрозоля, вымывание и седиментация, осуществляется с использованием формул, предлагаемых в [3].

Для численного решения уравнения (2) используется метод расщепления по физическим процессам. На первом этапе учитывается лишь процесс адвекции примеси, на втором – турбулентной диффузии. На третьем этапе решается уравнение, описывающее трансформационные процессы. На шаге адвекции используется схема TVD [7], на шаге, учитывающем турбулентный обмен, – неявная схема в совокупности с расщеплением по координатам.

Постановка обратной задачи. Пусть известно, что в прямоугольной области A, о которой говорилось выше, в некоторой точке $X_0 = (x_0, y_0, z_0)$ с известной координатой z_0 расположен источник примеси с интенсивностью, задаваемой формулой (1), причем величины Q и t_0 неизвестны. Необходимо по результатам трех измерений концентрации примеси в некоторых точках $X_i = (x_i, y_i, z_i)$, $i = 1(1)3$ определить горизонтальные координаты источника x_0, y_0 и величину его интенсивности Q. Следует отметить, что так как время начала работы источника t_0 неизвестно, то задача может иметь решение лишь в том случае, когда

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}\Big|_{t_\text{и}} = 0, \quad i = 1\,(1)\,3,$$

где c_i – концентрация примеси в i-й точке. Кроме того, предполагается, что до начала работы источника во всех точках области A примесь отсутствовала, т.е. $c = 0$ при $t < t_0$.

Для решения этой задачи используем технику сопряженных уравнений. Следуя [2], получим следующую сопряженную (2) модель:

$$\frac{\partial c^*}{\partial t} + \mathbf{V}\,\mathrm{grad}\, c^* - \nabla\,\mu\,\nabla\, c^* - \frac{\partial}{\partial z}\,\nu\,\frac{\partial c^*}{\partial z} + \frac{1}{\rho} I_c^* = f^*. \tag{8}$$

Граничные условия имеют следующий вид. На нижней границе

$$\nu\,\frac{\partial c^*}{\partial z}\Big|_{z=0} = k_s\left(c^*\Big|_{z=0} - c_s\right) + Q_s. \tag{9}$$

На верхней границе

$$\frac{\partial c^*}{\partial z}\Big|_{z=z_\text{т}} = k_c\left(c_\text{т} - c^*\Big|_{z=z_\text{т}}\right). \tag{10}$$

На части боковой границы, где происходит приток воздуха,

$$c^* = 0\,. \tag{11}$$

На части боковой границы, где наблюдается отток воздуха из области решения,

$$\mu\,\frac{\partial c^*}{\partial n} + u_n\, c^* = 0\,, \tag{12}$$

где u_n – составляющая скорости ветра, нормальная к границе области решения.

Начальное условие $c^* = 0$ при $t = t_\text{и}$.

Пусть везде, за исключением некоторой точки $X_l = (x_l, y_l, z_l)$, $f^* = 0$. В точке X_l зададим f^* следующим образом:

$$f^* = f(t) = \begin{cases} 1, & \text{при } t \geq t_{\text{и}}, \\ 0, & \text{при } t \quad t_{\text{и}}. \end{cases} \tag{13}$$

Проинтегрируем (8) с указанными граничными и начальными условиями до достижения установившегося состояния, то есть до достижения условия

$$\frac{\partial c_l^*}{\partial t} = 0, \quad X \in \{A\}. \tag{14}$$

При этом $c_l^* = c_l^*(x, y, z)$, где c_l^* – решение задачи (8)–(12) при условии, что f^* задается указанным выше образом.

Функцию c^* можно трактовать как меру чувствительности установившейся концентрации примеси в точке X_l к действию точечного стационарного источника примеси, расположенного в некоторой точке области A, а величину $1/c_l^*(x, y, z)$ – как интенсивность источника, расположенного в точке с координатами x, y, z, создающего в точке X_l установившуюся концентрацию примеси, равную единице. Тогда, в силу линейности задачи

$$\phi_l(x, y, z) = c_l \,/\, [c_l^*(x, y, z)] \tag{15}$$

является интенсивностью точечного стационарного источника, расположенного в точке с координатами x, y, z и создающего в точке X_l установившуюся концентрацию примеси c_l.

В связи с единственностью решения сопряженной задачи [2], привлекая априорную информацию, содержащуюся в постановке задачи, получаем, что в области A найдется единственная точка X_0, для которой

$$\phi_1(x_0, y_0, z_0) = \phi_2(x_0, y_0, z_0) = \phi_3(x_0, y_0, z_0) = Q. \tag{16}$$

Координаты x_0, y_0 и величина Q являются решением сформулированной обратной задачи.

Так как задача (8)–(12) решается численно с использованием метода, применяемого при решении прямой задачи, то условие для нахождения решения (16) принимает вид

$$(x_0, y_0) = \underset{(x,y)}{\arg\min} \left\{ (\phi_1(x, y, z_0) - \phi_2(x, y, z_0))^2 + (\phi_1(x, y, z_0) - \phi_3(x, y, z_0))^2 + (\phi_2(x, y, z_0) - \phi_3(x, y, z_0))^2 \right\}, \tag{17}$$

$$Q = (1 / 3)\,(\phi_1^* + \phi_2^* + \phi_3^*)\,, \tag{18}$$

где

$$(\phi_1^*, \phi_2^*, \phi_3^*) = \underset{(\phi_1, \phi_2, \phi_3)}{\arg} \min \left\{ (\phi_1(x,y,z_0) - \phi_2(x,y,z_0))^2 + (\phi_1(x,y,z_0) - \phi_3(x,y,z_0))^2 + (\phi_2(x, y, z_0) - \phi_3(x,y,z_0))^2 \right\}, \tag{19}$$

(x, y) – координаты узлов сетки.

Методика исследования чувствительности. При детерминистском подходе к исследованию чувствительности в качестве меры чувствительности решения задачи к вариациям некоторого параметра принимается значение производной от решения по этому параметру. Производная при этом трактуется в классическом смысле этого слова при анализе ее чувствительности к скалярным параметрам или в смысле Гато в случае параметров-функций. Однако, как уже отмечалось, конструктивного суждения о степени точности решения, основываясь на данном подходе, получить невозможно, так как параметры модели и результаты измерений являются случайными величинами, реализация которых дана с некоторой неизвестной нам погрешностью. В связи с этим представляется целесообразным рассмотрение решения задачи как некоторой случайной величины (случайного поля) и использование при анализе чувствительности решения задачи методов теории вероятностей и математической статистики.

При указанном подходе в качестве меры чувствительности должна выступать зависимость распределения решения задачи от распределения соответствующих параметров. Такой мерой может также являться зависимость некоторой характеристики распределения решения от характеристик распределения параметров. Для этого нами предлагается использовать ширину интервала (объем области для векторных решений), в котором с определенной вероятностью находится решение задачи при заданном распределении значений влияющего параметра. При таком выборе меры возможны анализ чувствительности к одному параметру и сравнительная оценка степени влияния различных параметров на точность решения. Для анализа влияния ошибок параметров на достоверность решения мерой чувствительности выступает вероятность нахождения решения в интервале некоторой длины при заданном распределении параметра.

Если задача является линейной и лишь один параметр является случайным, то задача исследования чувствительности значительно упрощается. Действительно, в этом случае решение задачи является линейной функцией параметра и, следовательно, будет обладать распределением того же типа, что и параметр. Характеристики распределения могут быть определены с использованием известных формул теории вероятностей. По ним без труда вычисляются указанные меры чувствительности точности и достоверности решения. Ситуация в корне меняется в нелинейном случае, в котором для проведения исследования требуется привлечение аппарата математической статистики, в частности метода имитационного моделирования.

Проиллюстрируем предлагаемую методику на примере исследования чувствительности сформулированной выше обратной задачи переноса примесей в атмосфере. Будем анализировать влияние ошибок измерения концентрации примеси на точность и достоверность определения координат и интенсивности источника.

Первым этапом является моделирование реализаций решения обратной задачи. Вначале моделируются реализации результатов измерения. Запишем результат измерения следующим образом:

$$\hat{c}_i = \bar{c}_i + \hat{\delta}_c, \qquad (20)$$

где c_i – математическое ожидание результата измерения в i-й точке; $\hat{\delta}_c$ – ошибка измерения.

Математическое ожидание результата измерения в некоторой точке является результатом решения прямой задачи, описанной выше. При моделировании ошибок измерения вводятся следующие предположения:

– систематическая ошибка отсутствует;
– ошибки измерения в разных точках не коррелированы между собой;
– измерения являются равноточными;
– ошибка распределена по нормальному закону.

Так как в паспортных данных измерительных приборов указывается лишь относительная погрешность, то среднеквадратическое отклонение ошибки измерения определяется исходя из правила трех сигм.

Для моделирования ошибки используется стандартная процедура статистического моделирования нормально распределенной случайной величины. Смоделировав ошибки измерения во всех трех точках и прибавив к ним концентрацию примеси в соответствующих точках, полученную при решении прямой задачи, получаем реализацию вектора результатов измерений. Решив обратную задачу с этими исходными данными, получаем реализацию решения обратной задачи. Процедура повторяется до тех пор, пока объем выборки не достигнет требуемого значения (обычно несколько сотен реализаций).

С использованием полученной выборки строится интервальный вариационный ряд и оценивается закон распределения результатов решения. Для этого выполняются следующие действия. Оценивается квадрат асимметрии и эксцесс распределения результатов решения. По диаграмме <асимметрия–эксцесс> выдвигается гипотеза о законе распределения результатов решения. Гипотеза проверяется с использованием критерия Хи-квадрат. При выполнении гипотезы параметры этого закона оцениваются по материалам выборки.

Следующим этапом является непосредственное оценивание чувствительности решения. Для оценивания чувствительности точности решения задаются значением его достоверности (вероятностью попадания решения в некоторый интервал). По таблице распределения решения определяют ширину этого интервала. При этом интервал может быть выбран двумя способами: как интервал минимальной длины или как интервал, расположенный таким образом, что вероятность попадания решения справа и слева от него одинакова.

При оценивании чувствительности достоверности решения к точности измерения концентрации примеси задаются шириной интервала, в который должно попадать решение, и определяют вероятность такого попадания. Интервал может быть расположен также двумя способами: как интервал, максимизирующий вероятность попадания в него, или как интервал, расположенный таким образом, что вероятность попадания решения справа и слева от него одинакова.

Предлагаемая методика может быть обобщена на случай наличия нескольких источников, а также может применяться при исследовании чувствительности решения к вариациям других параметров, например ветра. В этом случае необходимо будет моделировать случайное поле – поле ветра.

1. Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей. / Под ред. Ф. Ньюстадта и Х. Ван Дока. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 351 с.
2. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 319 с.
3. Солдатенко С.А., Соболевский О.М. // Оптика атмосферы и океана. 1994. Т. 7. N 2. С. 213–222.
4. Broecker W.S., Peng T.H. // Tellus. 1974. V. 26. P. 21–35.
5. Newell R.I. // J. Geophys. Res. 1977. V. 82. P. 1449–1450.
6. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкости. Т. 2. М.: Мир, 1991. 552 с.

Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск
Военная инженерно-космическая академия им. А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург

Поступила в редакцию
27 декабря 1994 г.

V.S. Komarov, S.A. Soldatenko, S.S. Suvorov. **Investigation of Sensitivity of Impurities Transfer through the Atmosphere Models (Simulation and Method).**

An approach is proposed in the paper to study sensitivity of models of inert impurities transfer through the atmosphere based on stochastic interpretation of the model parameters and the measuring results. The inverse problem of impurity transfer is also examined together with the method of determining the sensitivity of its solution to an impurity concentration variations. Along with the case of one stationary source, the proposed method can cover the case of several concentrated sources with stationary or pulse regimes of operation.