

ФИЗИКА, МАТЕМАТИКА

УДК 519.5, 519.6

Наац Виктория Игоревна, Травкина Татьяна Васильевна

РАЗРАБОТКА РЕКУРСИВНОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ ОЦЕНКИ АТМОСФЕРНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА И РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Работа посвящена построению вычислительных методов и алгоритмов для оценки атмосферной турбулентности на основе решения так называемых «обратных» задач теории переноса загрязняющих примесей в пограничном слое атмосферы.

Ключевые слова: математические модели теории переноса, рекурсивный алгоритм, численные исследования, оценка атмосферной турбулентности.

Naac Viktoria Igorevna, Travkina Tatiana Vasilievna

DEVELOPMENT OF RECURSIVE COMPUTING ALGORITHM FOR AN ASSESSMENT OF ATMOSPHERIC TURBULENCE ON THE BASIS OF THE EQUATION OF TRANSFER AND RESULTS OF CALCULATIONS

Work is devoted to creation of computing methods and algorithms for an assessment of atmospheric turbulence on the basis of the solution of so-called return tasks of the theory of transfer of polluting impurity in an atmosphere interface.

Key words: mathematical models of transport theory, a recursive algorithm, numerical studies, the evaluation of the atmospheric turbulence.

Необходимость построения подобного математического и алгоритмического обеспечения связана с разработкой информационно-измерительных систем экологического мониторинга атмосферы в пределах пограничного слоя вблизи промышленных предприятий [1]. Постановка, обоснование и некоторые подходы к решению этих задач излагались ранее в работах авторов [1–3], в настоящей работе представлены результаты дальнейших исследований, развивающих данное направление. Изложение материала в статье начинается с рассмотрения обратных коэффициентных задач для уравнения турбулентного переноса, целью которых является определение коэффициентов турбулентной диффузии по данным наблюдений по рассеянию примесей в условиях пограничного слоя атмосферы. Показано, что в рамках вариационного подхода к задачам теории переноса обратные коэффициентные задачи могут быть сведены к решению последовательно систем линейных уравнений относительно компонент вектора – коэффициентов разложения функции $K(x, t)$, описывающей пространственно-временную изменчивость коэффициентов турбулентной диффузии. Указанная задача решается с применением регуляризирующего алгоритма, позволяющего ослабить влияние ошибок в исходных данных на точность решений обратных коэффициентных задач для уравнений параболического типа. Отличительной особенностью алгоритмов, рассматриваемых в данной работе, является использование многочленов Бернштейна в параметризованной модели уравнения переноса для аппроксимации исходных данных, представленных дискретными измерениями, а также соответствующих производных, входящих в исходное уравнение переноса. Интерес также представляют результаты численных исследований алгоритма. Рассмотрим основные этапы построения вычислительной модели.

Уравнение переноса загрязняющих примесей в приземном слое атмосферы в условиях турбулентности в направлении координатной оси $\vec{Ox}$ записывается в виде [1]:

$$\dot{q}(x, t) + \alpha q(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} (V_x(x, t)q(x, t) - K(x, t)q'(x, t)) = S(x, t), \quad (1)$$

в котором функция $q(x, t)$ – описывает поле концентрации переносимого вещества, $V_x(x, t)$ – скорость ветра в направлении оси $\vec{Ox}$ и $K(x, t)$ – коэффициент турбулентной диффузии. Функция $S(x, t)$

в правой части уравнения (1) описывает распределенный источник в рассматриваемой задаче диффузионного переноса. В отличие от так называемых «прямых задач», заключающихся в определении концентрации $q(x, t)$ [1], обратная коэффициентная задача, связанная с определением поля коэффициента $K(x, t)$, предполагает известными функции $q(x, t)$, $V_x(x, t)$ и $S(x, t)$. Интегрируя уравнение (1), преобразуем его к виду:

$$Kq' = Vq - \varphi(x, t), \quad (2)$$

где обозначено

$$C(t) = V(X_0, t)q(X_0, t) - K(X_0, t)q'(X_0, t), \quad (3)$$

$$\varphi(x, t) = \int_{X_0}^x (S - \alpha q - \dot{q}) dx + C(t), \quad (4)$$

откуда видно, что модель (2) – (4) позволяет найти значения коэффициентов турбулентной диффузии $K(x, t)$ в точках (x, t) области $\Omega = [0, X] \times [0, T]$ при условии, что известны функции $q(x, t)$, $\dot{q}(x, t) = q'_t(x, t)$, $q'_x(x, t)$, $V(x, t)$, $S(x, t)$ и $\alpha(t)$. Неопределенными остаются значения функции $q'_x(x, t)$ в точках (x, t) , в которых она обращается в ноль. Построение численного метода для решения задачи (2) – (4) основано на том, что искомая функция $K(x, t)$, согласно теории вариационных методов [1, 2], в пределах области Ω представляется в виде:

$$K_m(x, t) = \sum_{k=0}^m C_k(t) \cdot u_k(x), \quad (5)$$

где $\{u_k(x)\}_m$ – система непрерывных базисных функций на интервале $[0, X]$. Считаем далее, что требования к $K(x, t)$ и указанному базису, обеспечивающие сходимость по норме $K_m(x, t)$ к $K(x, t)$ во всех точках (x, t) , выполнимы. Подставляя (5) в (2), получим:

$$q' \cdot \sum_{k=0}^m C_k(t) \cdot u_k(x) = Vq - \varphi(x, t). \quad (6)$$

В итоге задача сводится к определению коэффициентов разложения $\{C_k(t)\}$ из данного функционального уравнения. Применяя далее метод взвешенной невязки [1] и выбирая систему весовых функций $\{\omega_l, \Omega_l\}_m$, $\bigcup_{l=0}^m \Omega_l = [0, X]$ [1], уравнение (6) приводим к системе уравнений относительно коэффициентов разложения $\{C_k(t)\}$, а именно

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{l,k}} \sum_{k=0}^m C_k(t) \cdot \omega_l(x) \cdot u_k(x) \cdot q'(x, t) dx = \\ = \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \cdot V(x, t) q(x, t) dx - \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \varphi(x, t) dx, \quad l = \overline{0, m}, \end{aligned} \quad (7)$$

в котором $C_0(t)$ и $C_k(t)$ известны из начальных условий. Выражение (7) можно переписать

$$\begin{aligned} C_0(t) \int_{\Omega_{l,0}} \omega_l(x) \cdot u_0(x) \cdot q'(x, t) dx + \sum_{k=1}^{m-1} C_k(t) \int_{\Omega_{l,k}} \omega_l(x) \cdot u_k(x) \cdot q'(x, t) dx + \\ + C_m(t) \int_{\Omega_{l,m}} \omega_l(x) \cdot u_m(x) \cdot q'(x, t) dx = \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \cdot V(x, t) q(x, t) dx - \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \varphi(x, t) dx. \end{aligned} \quad (8)$$

Следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 a_{l,0}(t) &= \int_{\Omega_{l,0}} \omega_l(x) \cdot u_0(x) \cdot q'(x,t) dx, \\
 a_{l,k}(t) &= \int_{\Omega_{l,k}} \omega_l(x) \cdot u_k(x) \cdot q'(x,t) dx, \\
 a_{l,m}(t) &= \int_{\Omega_{l,m}} \omega_l(x) \cdot u_m(x) \cdot q'(x,t) dx, \\
 b_l^{(1)}(t) &= \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \cdot V(x,t) q(x,t) dx, \quad b_l^{(2)}(t) = \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \varphi(x,t) dx,
 \end{aligned}$$

позволяют представить (8) в виде алгебраической системы уравнений относительно вектора $\vec{C}(t)$ для каждого момента времени $t \in [0, T]$. Имеем

$$A(t) \cdot \vec{C}(t) = \vec{b}(t), \quad \vec{b}(t) = \vec{b}^{(1)}(t) - \vec{b}^{(2)}(t). \quad (9)$$

Таким образом, определение коэффициента турбулентной диффузии методом обратной задачи свелось к решению системы алгебраических уравнений (9) для каждого момента времени t . Формально поставленную выше задачу можно считать решенной. Однако необходимо иметь в виду, что исходное распределение $q(x,t)$ определяется в эксперименте по постановке задачи и, следовательно, $q(x,t)$ и тем более $\dot{q}(x,t) = q'_t(x,t)$, $q'_x(x,t)$ известны приближенно. Значит, в системе (8) и матрица $A(t)$ и её правая часть известны с ограниченной точностью. Это лишает возможности увеличивать m в целях уменьшения ошибки аппроксимации функции $K(x,t)$ рядом $K_m(x,t)$. Другим фактором, ограничивающим эффективность предложенного алгоритма, может являться так называемая слабая обусловленность матрицы $A(t)$ для некоторых $t \in [0, T]$. Эти обстоятельства указывают на то, что в качестве обратной матрицы $A^{-1}(t)$ в системе (8) предпочтительно брать обобщенную обратную матрицу, определяемую, согласно выражению:

$$A_\alpha^{-1} = (A^T A + \alpha \cdot I)^{-1} \cdot A^T,$$

обеспечивающую получение так называемого «нормального» решения системы (8). Нетрудно видеть, что при $\alpha \rightarrow 0$ матрица $A_\alpha^{-1} \rightarrow A^{-1}$. При $\alpha > 0$ нормальное решение $\vec{C}_\alpha(t)$ по сравнению с $\vec{C}(t)$ характеризуется большей устойчивостью к ошибкам, как в матрице $A(t)$, так и в правой части системы (8). Доказательство этих утверждений можно найти в [1].

Построение вычислительной модели для оценки значений коэффициентов турбулентной диффузии выполняется для так называемой параметризованной модели одномерного уравнения переноса. Построение и обоснование подобной модели подробно рассмотрено в работе [1]. В соответствии с методом параметризованных моделей для задачи (1) вводятся нормировочные коэффициенты $\{\alpha, \beta, \gamma, \xi\}$, а также нормированные распределения полей и переменных, принимающие значения из интервала $[0, 1]$:

$$\begin{aligned}
 \gamma \cdot K(x,t) \cdot q'(x,t) &= \beta \cdot V(x,t) \cdot q(x,t) - \varphi(x,t), \\
 \varphi(x,t) &= \int_{x_0}^x (\xi \cdot S(x',t) - \hat{q}(x',t) - \tilde{\alpha}(t) \cdot q(x',t)) dx'.
 \end{aligned} \quad (10)$$

Далее, в соответствии с (5), искомую функцию $K(x,t)$ в пределах области $\Omega = [0, 1]$ представим в виде:

$$K_m(x, t_j) = \sum_{k=0}^m C_k(t_j) \cdot u_k(x), \quad (11)$$

где $\hat{x} \in \hat{\Omega}$, $j = \overline{1, n}$, $\hat{t}_j \in [0, 1]$. Значения всех полей исходных данных уравнения (10) представлены дискретными значениями измерений. Поэтому необходимо аппроксимировать исходные функции с целью получения их непрерывных аналогов – функций. Точность аппроксимации исходных данных и их производных существенно влияет на точность получаемого решения исходной задачи. Аппроксимация функций, а также их производных в настоящей работе проводилась многочленами Бернштейна. Выбор многочленов Бернштейна обусловлен тем, что он достаточно хорошо исследован и обладает

рядом замечательных свойств [1] и применим к распределениям параметризованной модели. Соответствующие представления распределений модели (10) многочленами Бернштейна имеют вид:

$$q(x, t_j) \approx \sum_{i=0}^m q(x, t_j) p_{m,i}(x) = B_m(x, t_j, q), \quad (12a)$$

$$\frac{\partial q(x, t_j)}{\partial x} \approx m \sum_{i=0}^{m-1} [q(x_{i+1}, t_j) - q(x_i, t_j)] p_{m-1,i}(x) = B'_m(x, t_j, q), \quad (12б)$$

$$\frac{\partial q(x, t_j)}{\partial t} \approx \frac{B_m(x, t_{j+1}, q) - B_m(x, t_j, q)}{2\Delta t} = \dot{q}_m, \quad (12в)$$

$$V(x, t_j) \approx \sum_{i=0}^m V(x, t_j) p_{m,i}(x) = B_m(x, t_j, V), \quad (12г)$$

$$S(x, t_j) \approx \sum_{i=0}^m S(x, t_j) p_{m,i}(x) = B_m(x, t_j, S), \quad (12д)$$

$$p_{m,i}(x) = C_m^i(x_i)^m (1-x_i)^{m-r}, \quad x \in [0,1]. \quad (12е)$$

С учетом выражений (12) выражения (9) могут быть переписаны следующим образом:

$$a_{l,0}(t_j) = \int_{\Omega_{l,0}} \omega_l(x) \cdot u_0(x) \cdot \frac{B_m(x, t_{j+1}, q) - B_m(x, t_j, q)}{2\Delta t} dx, \quad (13a)$$

$$a_{l,k}(t_j) = \int_{\Omega_{l,k}} \omega_l(x) \cdot u_k(x) \cdot \frac{B_m(x, t_{j+1}, q) - B_m(x, t_j, q)}{2\Delta t} dx, \quad (13б)$$

$$a_{l,m}(t_j) = \int_{\Omega_{l,m}} \omega_l(x) \cdot u_m(x) \cdot \frac{B_m(x, t_{j+1}, q) - B_m(x, t_j, q)}{2\Delta t} dx, \quad (13в)$$

$$b_l^{(1)}(t_j) = \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \cdot B_m(x, t_j, V) \cdot B_m(x, t_j, q) dx, \quad (13г)$$

$$b_l^{(2)}(t_j) = \int_{\Omega_l} \omega_l(x) \left(\int_{x_0}^x (\xi \cdot B_m(x', t_j, S) - B'_m(x', t_j, q) - \alpha(t_j) \cdot B_m(x', t_j, q)) dx' \right) dx, \quad (13д)$$

Соответствующее выражение для сглаживающего функционала [2, 3] запишется таким образом:

$$T_{\alpha_j}(\vec{C}(t_j)) = \sum_{l=0}^m \left[\sum_{k=0}^m (a_{l,k}(t_j) C_k(t_j) - b_l(t_j)) \right]^2 + \hat{\alpha}_j \cdot \rho \cdot \sum_{k=0}^m [C_k(t_j) - C_k(t_{j-1})]^2, \quad (14)$$

в котором обозначено $\vec{C}(\hat{t}_j) = \{C_k(\hat{t}_j)\}$. Решая далее задачу минимизации

$$T_{\alpha_j}(\vec{C}(t_j)) \Rightarrow \min_{\vec{C}(t_j)}, \quad (15)$$

с помощью так называемого «эвристического симплексного» метода [1], находим искомые коэффициенты $\vec{C}_{\alpha_j}(\hat{t}_j)$ при соответствующем значении параметра регуляризации $\hat{\alpha}_j$ для каждого фиксированного момента времени $\hat{t}_j$, $j = \overline{1, n}$. Решение задачи (17) – (18) осуществляется при следующих заданных начальных и граничных условиях:

$$C_k(t_0) = C_k(0) = K(x_k, 0), \quad k = \overline{0, m}, \quad j = 0; \quad (16)$$

$$C_0(t_j) = K(x_0, t_j) = K(0, t_j), \quad j = \overline{1, n}; \quad C_m(t_j) = K(x_m, t_j) = K(1, t_j), \quad j = \overline{1, n}. \quad (17)$$

В итоге искомое решение обратной коэффициентной задачи (10) по определению коэффициента турбулентной диффузии запишется в соответствии с (11).

Важным вопросом является выбор базисных функций в выражении (7). Если принять, что системы базисных функций $\{\omega_l, \Omega_l\}_m$ и $\{u_k, \Omega_l\}_m$, $\bigcup_{l=0}^m \Omega_l = [0, X]$ совпадают, то мы приходим к методу

Галеркина [1]. Для построения относительно не сложных вычислительных алгоритмов в настоящей работе выбираются треугольные кусочно-линейные базисные функции вида:

$$u_k(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}, & \text{если } x \in [x_{k-1}, x_k], \\ \frac{x_{k+1} - x}{x_{k+1} - x_k}, & \text{если } x \in (x_k, x_{k+1}], \\ 0, & \text{если } x \in (-\infty, x_{k-1}) \cup (x_{k+1}, +\infty), \end{cases} \quad (18)$$

$$u_0(x) = \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0}, \quad u_m(x) = \frac{x - x_{m-1}}{x_m - x_{m-1}}. \quad (19)$$

Применение базисных функций (18) – (19) приводит к реализации известного численного метода конечных элементов в общей структуре вычислительной схемы. В завершение отметим, что выбор параметра регуляризации в (14) – (15) осуществляется по так называемому «методу выбора параметра регуляризации по невязке», алгоритм которого подробно описан в работе [1, 2], применительно к решению обратной коэффициентной задачи.

Программная реализация вычислительного алгоритма, описанного выше, выполнялась при следующих исходных данных: $X = 1600 \text{ м} = 1,6 \text{ км}$, $T = 600 \text{ с} = 10 \text{ мин}$, $q_0 = 0,75 \frac{\text{кг}}{\text{м}}$, $V_0 = 5 \frac{\text{м}}{\text{с}}$,

$K_0 = 150 \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$, $\alpha_0 = 0,025 \frac{1}{\text{с}}$, $m = 25$, $n = 25$, $\beta = 4,33$, $\gamma = 6,58E - 02$, $\xi = 16,91$. Обоснование

выбора таких значений исходных данных приведено в работе [1]. На основе этих данных вычисляются диапазоны изменения значений концентрации примесей $q(x, t) \in [q_{\min}, q_{\max}] = [0,37; 1,26] \left(\frac{\text{кг}}{\text{м}} \right)$,

$\forall x \in [0, X]$, $\forall t \in [0, T]$; поля скорости ветра $V(x, t) \in [V_{\min}, V_{\max}] = [2,64; 11,55] \left(\frac{\text{м}}{\text{с}} \right)$, $\forall x \in [0, X]$,

$\forall t \in [0, T]$; коэффициента турбулентной диффузии $K(x, t) \in [K_{\min}, K_{\max}] = [93; 281] \left(\frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right)$,

$\forall x \in [0, X]$, $\forall t \in [0, T]$; интенсивности источника $S(x, t) \in [S_{\min}, S_{\max}] = [0; 3,57E - 02] \left(\frac{\text{кг}}{\text{м} \cdot \text{с}} \right)$,

$\forall x \in [0, X]$, $\forall t \in [0, T]$, $\alpha(t) \in [\alpha_{\min}; \alpha_{\max}] = [2,26E - 02; 2,75E - 02] \left(\frac{1}{\text{с}} \right)$, $\forall t \in [0, T]$,

$\tilde{\alpha}(t) = T \cdot \alpha(t)$. При этом в работе использовались алгоритмы [1], позволяющие генерировать дискретные значения распределений, входящих в параметризованную модель переноса (10), включая и точные значения поля турбулентности $K_T(x, t) = K^* \hat{K}(\hat{x}, \hat{t})$. В результате исходные данные представляются массивами дискретных значений $\{\hat{q}(i, j)\}$, $\{V(x_i, t_j)\}$, $\{K(x_i, t_j)\}$, $\{S(x_i, t_j)\}$ и $\{\alpha(j)\}$, $\{\hat{x}(i)\}$, $\{\hat{t}(j)\}$, $i = \overline{0, m}$, $j = \overline{0, n}$, нормированных на максимальный элемент каждого из них соответственно. Кроме того, в работе применяется алгоритм появления случайных ошибок δ при измерении «экспериментальных» значений $\hat{q}(i, j)$.

Численные исследования начинались с оценки погрешностей аппроксимации исходных данных и соответствующих производных многочленами Бернштейна и определении требуемой размерности задачи для обеспечения приемлемой точности. Погрешность вычислений оценивалась по обобщенной формуле:

$$\sigma_f(f, f_m) = \left(\frac{1}{(n+1) \cdot (m+1)} \sum_{j=0}^n \sum_{i=0}^m (f(x_i, j) - f_m(x_i, j))^2 \right)^{1/2}. \quad (20)$$

В таблице 1 приведены соответствующие результаты расчетов.

Таблица 1

Погрешность аппроксимации исходных данных и их производных многочленами Бернштейна

Наименование	Величина погрешности, σ	Требуемая размерность, m, n
$\sigma_V(\hat{V}, B_m(x, t, V))$	0,043	$n=10, m=22$
$\sigma_K(\hat{K}, B_m(x, t, K))$	0,041	$n=10, m=23$
$\sigma_S(\hat{S}, B_m(x, t, S))$	0,046	$n=10, m=22$
$\sigma_q(\hat{q}, B_m(x, t, q))$	0,050	$n=10, m=20$
$\sigma_{q'}(\hat{q}', B'_m(x, t, q))$	0,049	$n=10, m=25$
$\sigma_{\dot{q}}(\hat{\dot{q}}, \dot{q}_m)$	0,048	$n=30, m=25$

Из таблицы видно, что для достижения точности 0,05 необходимо $n = 30, m = 25$.

Аналогично оценивалась погрешность вычисления коэффициента турбулентной диффузии $\sigma_K(\hat{K}_T, \tilde{K}_m)$. На рисунках 1 и 2 показано пространственно-временное распределение полей турбулентности $\hat{K}_T(\hat{x}_i, t_j)$ и $\tilde{K}_m(\hat{x}_i, t_j)$ – его «точного» и «модельного» решений. Видно, что профиль распределения $\tilde{K}_m(\hat{x}_i, t_j)$ в целом повторяет профиль распределения $\hat{K}_T(\hat{x}_i, t_j)$, погрешность $\sigma_K(\hat{K}_T, \tilde{K}_m) = 8,73E-02$. При этом моделировалось появление случайных ошибок в поле концентрации примесей.

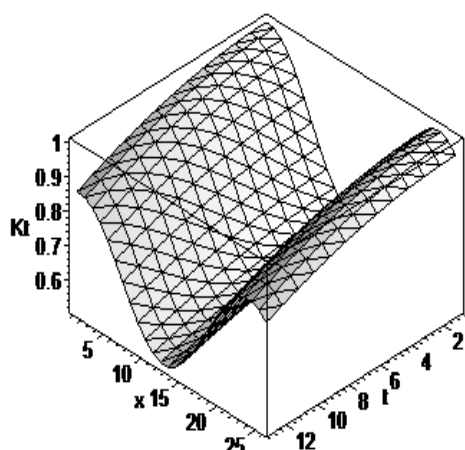


Рис. 1. $K_T(x_i, t_j)$ – Пространственно-временное распределение поля турбулентности точное решение $i = \overline{0, m}, j = \overline{1, n}$, при $\delta = 0,01$ и $\sigma_q(q, q^{(\delta)}) = 2,74E-03$. $\delta = 0,01$ – ошибка в измерениях поля концентрации примесей q (1%), $q^{(\delta)}$ – поле концентрации примесей q с погрешностью

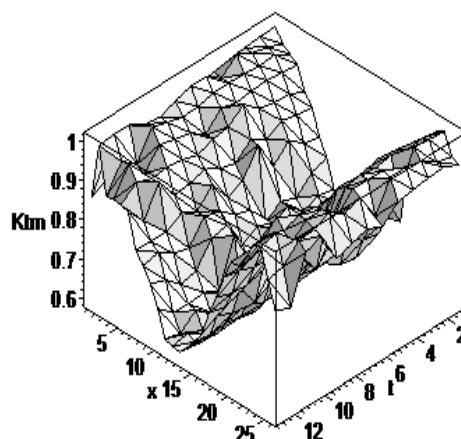


Рис. 2. Пространственно-временной распределение поля турбулентности $K_m(\hat{x}_i, t_j)$ – приближенное решение, $i = \overline{0, m}, j = \overline{1, n}$, при $\delta = 0,01$ и $\sigma_q(\hat{q}, \hat{q}^{(\delta)}) = 2,74E-03$, $\sigma_K(K_T, K_m) = 8,73E-02$

Литература

1. Наац В. И., Наац И. Э. Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 328 с.
2. Наац В. И. Вычислительная модель обратной коэффициентной задачи для уравнения переноса загрязняющих примесей в атмосфере // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. № 3. Ростов-н/Д., 2005. С. 21–36.
3. Наац В. И. Обратная коэффициентная задача для уравнения турбулентной диффузии // Вестник Сев-КавГТУ. 2003. № 1 (7). С. 89–94.