УДК 004.9:504:519.6

И.В. КОВАЛЕЦ

УСВОЕНИЕ ДАННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ В ЭЙЛЕРОВОЙ ЧИСЛЕННОЙ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТМОСФЕРНОГО ПЕРЕНОСА

Анотація. *Представлений алгоритм засвоєння даних вимірювань у чисельній гідродинамічній моделі атмосферного переносу. Попередні результати засвоєння свідчать про високу якість отриманих результатів. Даний алгоритм може бути використаний у системах підтримки прийняття рішень реального часу.*
Ключові слова: *асиміляція даних, обчислювальна гідродинамічна модель, система підтримки прийняття рішень.*

Аннотация. *Представлен алгоритм усвоения данных в численной гидродинамической модели атмосферного переноса. Предварительные результаты усвоения свидетельствуют о хорошем качестве полученных результатов. Данный алгоритм может быть использован в системах поддержки принятия решений реального времени.*
Ключевые слова: *ассимиляция данных, численная гидродинамическая модель, система поддержки принятия решений.*

Abstract. *An algorithm of assimilation of measurement data in computational fluid dynamics model is presented. The preliminary results of data assimilation demonstrate good quality of the results obtained. The proposed algorithm can be used in real-time decision support systems.*
Keywords*: assimilation of measurement data, computational fluid dynamics model, real-time decision support systems.*

1. Введение

В последнее время увеличивающаяся урбанизация привела к повышению уязвимости населения, проживающего в городских районах, от опасных атмосферных загрязнителей. Численные гидродинамические модели все активнее используются для расчета атмосферного переноса загрязнений в условиях городской застройки. В частности, автором была разработана эйлерова гидродинамическая модель, учитывающая влияние отдельных зданий на распространение атмосферных загрязнений в городской местности [1].

Помимо прямой задачи расчета распространения атмосферных загрязнений, во многих случаях не только мощность, но и координаты источника заранее неизвестны, и первоочередное значение приобретает задача идентификации местоположения и мощности источника атмосферного загрязнения. Решению обратных задач в рамках микромасштабных моделей городских загрязнений посвящено лишь небольшое число работ [2, 3]. В этих работах применялся байесовский подход, в котором оцениваются условные распределения вероятностей параметров источника при данном наборе измерений и данной модели. Оценка условной плотности распределения параметров источника является наиболее общим решением обратной задачи. Однако проведение такой оценки требует значительных вычислительных ресурсов, в то время как для практического применения, особенно в режиме реального времени, достаточно оценить минимум специальной функции, который [4], при условии гауссового распределения ошибок измерений и ошибок модели, совпадает с максимум апостериорной плотности распределения параметров источника. Следовательно, целью настоящей работы являются разработка и интеграция в гидродинамической модели эффективного алгоритма решения обратной задачи.

© Ковалец И.В., 2011

2. Постановка и метод решения задачи усвоения данных

Рассмотрим в рамках эйлерова подхода задачу турбулентной диффузии пассивной примеси от точечного стационарного источника:

$$Lc = u_i \frac{\partial c}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} D \frac{\partial c}{\partial x_i} = q^s \delta_\varepsilon \left(x - x^s \right) \delta_\varepsilon \left(y - y^s \right) \delta_\varepsilon \left(z - z^s \right) = f^s \left(x, y, z \right). \qquad (1)$$

Здесь D – коэффициент турбулентной диффузии, а правая часть (1) описывает стационарный точечный источник мощностью q^s, расположенный в точке с координатами $\left(x^s, y^s, z^s\right)$; функция скалярного аргумента $\delta_\varepsilon(.)$ в (1) является ступенчатой функцией: $\delta_\varepsilon(t) = 1/\varepsilon$, $|t| \le \varepsilon$ и $\delta_\varepsilon(t) = 0$ в противном случае.

Здесь параметр ε достаточно мал (гораздо меньше пространственного масштаба рассматриваемой задачи атмосферного переноса), так что источник может считаться точечным и решение не зависит от ε.

Решение (1) рассматривается в пространственно-временной области $G = [0,T] \times \Omega$, где T – временной промежуток интегрирования. Уравнение (1) дополняется начальным условием $c(x, y, z, 0) = 0$ и граничными условиями, соответствующими нулевым потокам через открытые и твердые границы: $\partial c / \partial \overline{n} = 0$, $(x, y, z) \in \partial\Omega$, где $\partial\Omega$ – граница области, а $\overline{n}$ – вектор нормали к ней. Поля скорости и турбулентной кинетической энергии, от которых зависит коэффициент турбулентной диффузии D, вычисляются с помощью гидродинамической модели.

Теперь предположим, что в вычислительной области Ω производятся измерения, которые показывают ненулевые стационарные значения концентрации c_n^o на некотором множестве измерений, расположенных в точках с координатами $\overline{r}_n^o = \left(x_n^o, y_n^o, z_n^o\right)$: $1 \le n \le K$, где K – суммарное количество измерительных станций, фиксирующих ненулевые значения концентрации. Измерения концентрации можно объединить в вектор $\overline{c}^o$.

Теперь рассмотрим концентрацию c_n^c, рассчитанную с помощью уравнения (1) в точке измерения n. Рассчитанное значение поля концентрации $c(x, y, z)$ в этой точке может быть сопоставлено измерению c_n^c с помощью следующего функционала: $c_n^c = \int_\Omega c \cdot p_n \cdot d\Omega = (c, p_n)$. Здесь p_n – так называемая пробная функция, которая может быть определена как $p_n(x, y, z) = \delta_\varepsilon\left(\overline{r} - \overline{r}_n^o\right) = 1/\varepsilon^3$, $\left|\overline{r} - \overline{r}_n^o\right| \le \varepsilon$ и $p_n(x, y, z) = 0$ в противном случае. Здесь, как и выше, параметр ε достаточно мал, чтобы получаемое значение соответствовало точечной концентрации.

Тогда задача идентификации мощности и положения источника может быть поставлена как задача нахождения значений q^s, x^s, y^s, z^s (объединенных в вектор управляющих параметров $\overline{\psi} = \left(q^s, x^s, y^s, z^s\right)^T$), которые доставляют минимум функционала качества:

$$J = \sum_{n=1}^{K} \left(c_n^c - c_n^o \right)^2 \to \min . \qquad (2)$$

Существуют различные методы численного решения проблемы минимизации функционала (2). В целом эти методы можно разделить на две большие категории: итерационные и прямые. В случае, когда функционал качества выпуклый, большое преимущество может быть получено за счет применения итерационных методов спуска, которые используют градиент целевой функции по отношению к управляющим параметрам. Однако функционал (2), вообще говоря, не выпуклый по отношению к координатам источника, и это обстоятельство приводит либо к отсутствию сходимости, либо к увеличению числа итераций, необходимых для достижения сходимости за счет применения методов спуска.

Для достижения большей надежности предложенного алгоритма в настоящей работе был использован прямой метод решения задачи. Для эффективного использования прямого метода требуется возможность быстрого расчета значения в данной точке измерения, соответствующего данному набору управляющих параметров. Для этой цели, вместо прямого интегрирования модели при каждом новом наборе управляющих параметров, можно построить и использовать функцию источник-рецептор (ИР), как это было первоначально предложено в работах Г.И. Марчука [5].

Функция источник-рецептор – это функция, ставящая в соответствие данному набору параметров источника вектор значений в данном наборе рецепторов. Такая функция может быть построена с помощью привлечения аппарата сопряженных уравнений. Определим сопряженную переменную c_n^*, являющуюся решением следующего сопряженного уравнения:

$$L^* c_n^* = -u_i \frac{\partial c_n^*}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} D \frac{\partial c_n^*}{\partial x_i} = p_n \,. \tag{3}$$

Здесь функция p_n определена вышеприведенным соотношением для пробной функции, а c_n^* удовлетворяет граничному условию непротекания.

Из определения сопряженного оператора легко видеть, что $(p_n, c) = \left(f^s, c_n^*\right)$. Тогда решение уравнения (1) в точке n может быть получено с помощью соотношения

$$c_n^c = q^s \cdot c_n^*\left(x^s, y^s, z^s\right), \tag{4}$$

где выражение в правой части (4) и есть функция источник-рецептор. Следовательно, для определения ИР необходимо для каждой точки измерений решить сопряженное уравнение (3) с правой частью, соответствующей данной точке измерений.

Для численного решения обратной задачи уравнения (1) и (3) аппроксимируются на вычислительной сетке. Дискретными аналогами непрерывных функций $c(x,y,z)$ и $c_n^*(x,y,z)$, а также функции источника $f^s(x,y,z)$ являются соответствующие векторы $\overline{c}$, $\overline{c}_n^*$, $\overline{f}^s$, определенные на вычислительной сетке и, соответственно, имеющие размерность, совпадающую с размерностью сетки N: $\overline{c}, \overline{c}_n^*, \overline{f}^s \in R^N$. Функция источника аппроксимируется с помощью интерполяции по методу ближайшего соседа. Таким образом, ненулевое значение функции источника задается только в узле k^s, ближайшем к местоположению источника. Следовательно, элементы вектора $\overline{f}^s$ определяются соотношением $f_k^s = q^s \delta_{k,k^s}$, где δ_{k,k^s} – символ Кронекера.

Аппроксимация уравнения (1) может быть записана в следующем общем виде: $\underline{\underline{L}}\overline{c} = \overline{f}^s = q^s \delta_{k,k^s}$, где матрица $\underline{\underline{L}}$ соответствует численной аппроксимации оператора L. Соответствие между значением концентрации в точке измерения и сеточным полем концентрации задается линейной интерполяцией: $c_n^c = \left(\overline{p}_n\right)^T \overline{c}(t) = \left(\overline{p}_n, \overline{c}\right)$, в которой вектор весовых коэффициентов $\overline{p}_n \in R^N$ определяется конкретным видом интерполяции, а правая часть является скалярным произведением в эвклидовом пространстве векторов размерности N.

Таким образом, дискретный аналог сопряженного уравнения (3) может быть записан в следующем виде: $\underline{\underline{L}}^* \overline{c}_n^* = \overline{p}_n$, где матрица $\underline{\underline{L}}^*$ соответствует численной аппроксимации оператора L^*. Тогда дискретная функция источник-рецептор может быть записана в виде $c_n^c \approx q^s \cdot c_{n,k^s}^*$.

Теперь исходная непрерывная постановка задачи минимизации может быть заменена следующей дискретной постановкой: найти такую пару значений $\left(\tilde{q}^s, \tilde{k}^s\right)$, которая минимизирует функционал качества (2). С использованием приведенных выше соотношений легко получить соотношение для функционала качества J_k, соответствующего расположению источника в k-м узле сетки:

$$J_k\left(q^s\right) = \sum_{n=1}^{N_o} \left(c_{n,k}^* q^s - c_n^o\right)^2 .$$

Функционал $J_k\left(q^s\right)$ минимизируется по отношению к q^s, и для каждого узла сетки k вычисляется соответствующее минимальное значение $\tilde{J}_k$. Затем решение дискретной задачи минимизации получается путем выбора узла, в котором достигается минимальное значение среди всех $\tilde{J}_k$. Соответствующая пара $\left(q_{k^s}^s, k^s\right) = \left(q^s, k^s\right)$ является решением дискретной задачи минимизации, и вектор $\left(q^s, x_{k^s}, y_{k^s}, z_{k^s}\right)$ является аппроксимацией решения исходной непрерывной задачи минимизации.

Задача усвоения данных измерений сформулирована выше только для случая пассивной примеси, которая не оказывает влияния на остальные характеристики атмосферы. Следовательно, поля всех метеорологических элементов вычисляются заранее и сохраняются для последующего решения задачи атмосферного переноса. Сопряженное уравнение (3) решается интегрированием нестационарного сопряженного уравнения от достаточно большого T до $t = 0$, когда значения c_n^* можно считать полностью установившимися. Правые части сопряженных уравнений вычисляются на основании формул билинейной интерполяции. Уравнение (3) решается отдельно для каждого детектора с соответствующей правой частью, и полученное решение c_n^* сохраняется в бинарном файле. Таким образом, для данной измерительной сети с K сенсорами требуется K интегрирований уравнения (3).

Когда все переменные c_n^*, соответствующие всем рецепторам, вычислены, они используются в алгоритме минимизации. Как показали расчеты, минимизация сама по себе требует гораздо меньше времени, чем решение сопряженных уравнений. Поскольку уравнения (3) для разных датчиков могут быть решены независимо, предложенный алгоритм обладает большими возможностями распараллеливания. Потенциально достижимый коэффициент повышения вычислительной эффективности за счет распараллеливания практически равен числу K независимых процессов.

3. Результаты расчетов

Описанная методология усвоения данных была верифицирована на основании данных численных экспериментов с использованием “синтетических” измерений. В численных экспериментах изучался атмосферный перенос пассивной примеси среди массива прямоугольных препятствий. Концентрация загрязнителя измерялась массивом детекторов, расположенных в области, занятой загрязнителем. В качестве измерений принимались значения концентрации, рассчитанные моделью при истинных значениях параметров источника. При данном фиксированном числе измерений точки расположения измерений варьировались случайным образом, что позволяло оценить вероятность Р получения решения с заданной точностью при данном количестве измерений. В качестве основного критерия качества решения использовалось расстояние d_H по горизонтали от истинного положения источника до местоположения источника, оцененного в результате усвоения измерений. С учетом того, что характерный размер препятствий равнялся 10 м, решение считалось удовлетворительным при $d_H \leq 10$ м.

Полученная в результате расчетов зависимость вероятности успешного восстановления параметров источника от количества измерений, используемых в процедуре усвоения, представлена в табл. 1. Как можно видеть из данных, представленных в этой таблице, при использовании всего лишь шести значений измерений вероятность успешного восстановления параметров источника за счет процедуры усвоения достаточно высока (80%). При дальнейшем увеличении количества измерений эта вероятность возрастает до 100 %.

Таблица 1. Зависимость вероятности успешного восстановления параметров источника от количества измерений, используемых в процедуре усвоения

Кол-во датчиков	Вероятность Р, %	Кол-во датчиков	Вероятность Р, %
1	0	25	96
2	13	50	99
3	47,6	100	100
6	80	200	100

4. Выводы

Для численной гидродинамической модели атмосферной дисперсии вокруг зданий развит метод усвоения данных, позволяющий идентифицировать местоположение и мощность стационарного источника загрязнения. Метод основан на вариационном формализме, в рамках которого задача усвоения (или обратная задача) сводится к задаче оптимизации. Для решения задачи оптимизации используется прямой метод, в котором для вычисления функционала качества при данном наборе управляющих параметров (характеристик источника) используется функция рецептор-источник (РИ). Для построения этой функции используется аппарат сопряженных уравнений.

Вычислительное время расходуется в основном на построение функции РИ и прямо пропорционально количеству детекторов, умноженному на время однократного решения прямой задачи. Поскольку функция РИ может быть построена независимо для разных детекторов, предложенный алгоритм обладает большой возможностью для распараллеливания. Минимизация сама по себе производится за очень малое время.

Верификация алгоритма проведена на основе численных экспериментов с усвоением синтетических измерений для сценария обтекания массива кубических препятствий. Исследовалась зависимость качества получаемого решения от количества измерений, используемых для усвоения. Как показали расчеты, уже при использовании 6 и более измерений вероятность получения хорошего решения составляла 80% и выше. Таким образом, предложенный алгоритм может быть использован в системах поддержки принятия решений в области экологической и радиационной безопасности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ковалец И.В. Численная гидродинамическая модель атмосферной дисперсии загрязнений вокруг зданий / И.В. Ковалец // Сб. тр. ИПМЭ им. Г.Е. Пухова. – 2011. – № 57. – С. 3 – 10.

2. Chow F.K. Source Inversion for Contaminant Plume Dispersion in Urban Environments Using Building-Resolving Simulations / F.K. Chow, B. Kosović, S. Chan // J. Appl. Meteor. Climatol. – 2008. – Vol. 47. – P. 1553 – 1572.
3. Keats A. Information-driven receptor placement for contaminant source determination / A. Keats, E. Yee, F.S. Lien // Environmental Modelling and Software. – 2010. – Vol. 25, N 9. – P. 1000 – 1013.
4. Tarantola A. Inverse problem theory and methods for model parameter estimation / Tarantola A. – Philadelphia: SIAM Publishers, 2005. – 326 p.
5. Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем / Марчук Г.И. – М.: Наука, 1992. – 334 с.

Стаття надійшла до редакції 15.03.2011