УДК 519.644

UDC 519.644

МЕТОДИКА РАСЧЕТА ВЕРТИКАЛЬНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ КОЭФФИЦИЕНТА ТУРБУЛЕНТНОЙ ДИФФУЗИИ

A TECHNIQUE FOR COMPUTING OF THE TURBULENT DIFFUSION COEFFICIENT VERTICAL COMPONENT

Семенчин Евгений Андреевич
д. ф.-м. н., профессор, зав. кафедрой

Кузякина Марина Викторовна
аспирант
Кафедра высшей алгебры и геометрии, Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

Semenchin Evgeny Andreyevich
Dr. Sci. (Phys.-Math.), professor, Head of department

Kuzyakina Marina Viktorovna
postgraduate student
The higher algebra and geometry department , Kuban State University, Krasnodar, Russia

Предложена методика расчета вертикальной составляющей коэффициента турбулентной диффузии в математической модели рассеяния примеси в приземном слое атмосферы

The technique for computing of the turbulent diffusion coefficient vertical component in the context of a mathematical model of admixture dispersion in the surface layer is proposed

Ключевые слова: ФИЛЬТРАЦИЯ, КОНЦЕНТРАЦИЯ ПРИМЕСИ, ВЕРТИКАЛЬНАЯ СОСТАВЛЯЮЩАЯ КОЭФФИЦИЕНТА ТУРБУЛЕНТНОЙ ДИФФУЗИИ

Keywords: FILTRATION, ADMIXTURE CONCENTRATION, THE TURBULENT DIFFUSION COEFFICIENT VERTICAL COMPONENT

Введение

В настоящее время значительное число работ посвящено исследованию загрязнения атмосферы промышленными выбросами (см. [1] и библиографию, приведенную в этой монографии). Эти исследования, как правило, основаны на анализе математических моделей рассеяния примесей в турбулентной атмосфере, в частности, полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии при заданных для его решения краевых условиях. В рамках этих исследований большое прикладное значение имеют исследования, посвященные анализу и решению обратных задач: определить основные параметры атмосферной диффузии (фоновую концентрацию, коэффициенты турбулентной диффузии и т.д.) по замерам концентрации примеси в атмосфере [2]. В частности, задача определения вертикальной составляющей коэффициента турбулентной диффузии по указанным замерам, решению которой (с помощью метода стохастической линейной фильтрации Калмана-Бьюси) посвящена данная работа.

1. Постановка задачи

Математическая модель, описывающая процесс рассеяния примеси в приземном слое турбулентной атмосферы имеет вид [1]:

$$\frac{\partial q}{\partial t}+U\frac{\partial q}{\partial x}-w\frac{\partial q}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}K_x\frac{\partial q}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}K_y\frac{\partial q}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}K_z\frac{\partial q}{\partial z}+f\,,\ t\in[0,T]\,, \quad (1)$$

$$q(0,x,y,z)=0\,, \quad (2)$$

$$\{K_z\frac{\partial q}{\partial z}+wq\}\Big|_{z=z_0}=\{V_s q\}\Big|_{z=z_0}\,, \quad (3)$$

$$q(t,x,y,z)\to 0\,,\ x^2+y^2+z^2\to\infty\,,\ z\ge 0\,, \quad (4)$$

где $q(t,x,y,z)$ – средняя концентрация примеси в точке $(x,y,z)\in E_+^3$, $E_+^3=\{(x,y,z): x,y\in(-\infty;\infty), z\ge 0\}$, в момент времени t; K_x, K_y, K_z – коэффициенты турбулентной диффузии соответственно вдоль осей Ox, Oy, Oz; U – компонента средней скорости ветра вдоль оси Ox; w – скорость осаждения частиц примеси вдоль оси Oz на подстилающую поверхность; z_0 – коэффициент шероховатости подстилающей поверхности; $j\,(x,y,z)$, f, V_s – соответственно фоновая концентрация, функция источника, скорость сухого осаждения этой примеси.

Соотношения (1)–(4) определяют математическую модель процесса рассеяния примеси в турбулентной атмосфере [3].

Цель данной работы – предложить метод определения коэффициента турбулентной диффузии K_z по экспериментально заданным значениям концентрации примеси $q(t,x,y,z)$, мощности точечного источника непрерывного действия $Q(t)$ и параметрам модели (1) – (4): U, w, K_x, K_y.

Необходимость вычисления значений K_z по другим заданным значениям параметров математической модели (1) – (4) продиктована большими затруднениями, возникающими при экспериментальном определении его значений [3, 4].

2. Методика решения задачи определения вертикальной составляющей коэффициента турбулентной диффузии

Согласно [4] коэффициенты турбулентной диффузии K_x, K_y имеют вид:

$$K_x = K_y = K_0 U\ ,\ K_0 = const\ ,\ U = U(t,z)\ .$$

Поэтому задача определения K_x и K_y сводится к задаче определения U. Последняя – не вызывает на практике больших затруднений, поскольку современными техническими средствами легко определить изменения U от времени t и координаты z. Основная трудность заключается в нахождении коэффициента $K_z(t,z)$.

Пусть источник f в (1) является точечным с координатами (x_0, y_0, H), т.е. [3]

$$f(t,x,y,z) = Q(t)d(x-x_0)d(y-y_0)d(z-H)\ ,$$

где $d(s-s_0)$ – дельта-функция Дирака, $Q(t)$ – количество примеси, выбрасываемой источником в момент времени t.

Согласно [4] коэффициент турбулентной диффузии $K_z(t,z)$ возрастает в приземном слое атмосферы пропорционально высоте z:

$$K_z = K_1(t)z\ , \qquad (5)$$

где $K_1(t)$, $t \in [0,T]$, – согласно поставленной задаче, неизвестная функция подлежащая определению.

Из (5) и (1) следует, что

$$K_1(t) = \frac{\dfrac{\partial q}{\partial t} + U\dfrac{\partial q}{\partial x} - w\dfrac{\partial q}{\partial z} - \dfrac{\partial}{\partial x}K_x\dfrac{\partial q}{\partial x} - \dfrac{\partial}{\partial y}K_y\dfrac{\partial q}{\partial y} - Q(t)}{\dfrac{\partial q}{\partial z} + \dfrac{\partial^2 q}{\partial z^2}}\ . \qquad (6)$$

Таким образом для решения рассматриваемой обратной задачи достаточно вычислить

$$\frac{\partial q}{\partial t},\ \frac{\partial q}{\partial x},\ \frac{\partial q}{\partial z},\ \frac{\partial^2 q}{\partial x^2},\ \frac{\partial^2 q}{\partial y^2}\ \text{и}\ \frac{\partial^2 q}{\partial z^2}$$

в заданных точках (x, y, z) в момент времени t и подставить эти значения в правую часть (6).

Согласно [5] задача нахождения производной n-го порядка $z(t)$ функции $u(t)$ (т.е. $z(t) = u^{(n)}(t)$) сводится к решению (относительно $z(t)$) интегрального уравнения первого рода. В частности, для $z(t) = \frac{\partial u(t)}{\partial t}$ имеем уравнение

$$\int_0^t z(t)dt = u(t) - u(0), \tag{7}$$

для $z(t) = \frac{\partial^2 u(t)}{\partial t^2}$ - уравнение

$$\int_0^t (t-t) \cdot z(t)dt = u(t) - u(0) - t\left(\frac{\partial u(t)}{\partial t}\right)\Bigg|_{t=0}. \tag{8}$$

Предполагаем, что $u(0)$, $\frac{\partial u(0)}{\partial t}$ - заданные величины.

Обозначим

$$R_x(t,x,y,z) = \frac{\partial q(t,x,y,z)}{\partial x},\ R_z(t,x,y,z) = \frac{\partial q(t,x,y,z)}{\partial z},\ R_t(t,x,y,z) = \frac{\partial q(t,x,y,z)}{\partial t},$$

$$R_{xx}(t,x,y,z) = \frac{\partial^2 q(t,x,y,z)}{\partial x^2},\ R_{yy}(t,x,y,z) = \frac{\partial^2 q(t,x,y,z)}{\partial y^2},\ R_{zz}(t,x,y,z) = \frac{\partial^2 q(t,x,y,z)}{\partial z^2}.$$

Тогда (см. (7),(8)) для определения, например, $R_z(t,x,y,z)$ и $R_{zz}(t,x,y,z)$ будем иметь интегральные уравнения:

$$q(t,x,y,z) - q(t,x,y,0) = \int_0^z R_z(t,x,y,t)dt. \tag{9}$$

$$q(t,x,y,z) - q(t,x,y,0) = \int_0^z \left[(z-t) \cdot R_{zz}(t,x,y,t)\right]dt + z \cdot R_z(t,x,y,0). \tag{10}$$

Соотношения (9) и (10) представляют собой интегральные уравнения первого рода относительно неизвестных функций R_z и R_{zz} соответственно. Задача построения решения таких уравнений является некорректно поставленной [4].

При решении этой задачи перейдем от (9), (10) к их дискретным аналогам [3]:

$$q\ (t,x,y,z)-q\ (t,x,y,0)=\sum_{k=1}^{p}\left[R_z(t,x,y,z_k)\cdot r_k\right], \qquad (11)$$

$$q\ (t,x,y,z)-q\ (t,x,y,0)-z\cdot R_z(t,x,y,0)=\sum_{k=1}^{p}\left[(z_p-z_k)R_{zz}(t,x,y,z_k)\cdot r_k\right], \qquad (12)$$

$z_1,\ldots,z_p$ - точки деления интервала $[0,z]$,

$$r_k=\begin{cases}\dfrac{z_2-z_1}{2}, & k=1,\\ \dfrac{z_{k+1}-z_{k-1}}{2}, & k=2,..,(p-1),\\ \dfrac{z_p-z_{p-1}}{2}, & k=p.\end{cases} \qquad (13)$$

Согласно (11), (12) по значениям $q(t_1,x,y,z),\ldots,\ q(t_N,x,y,z)$, заданным в точке (x,y,z) в различные моменты времени $t_1,\ldots,t_N\in[0,s]$ с ошибками измерения соответственно $n_1=\tilde{n}(t_1)$, $n_2=\tilde{n}(t_2)$, $\ldots$, $n_N=\tilde{n}(t_N)$ ($\tilde{n}(t)$ – случайный процесс типа белого гауссова шума), требуется найти (восстановить) значения $R_z(t_1,x,y,z_k),\ldots,\ R_z(t_N,x,y,z_k)$ и $R_{zz}(t_1,x,y,z_k),\ldots,\ R_{zz}(t_N,x,y,z_k)$ соответственно, $k=1,\ldots,p$.

Введем в рассмотрение матрицу $A=(A_{ik})$, все столбцы которой одинаковы, для решения уравнения (11) матрица A имеет вид:

$$A_{ik}=r_k,\ k=1,\ldots,p,\ i=1,\ldots,N,$$

для решения уравнения (12) - вид:

$$A_{ik}=(z_p-z_k)\cdot r_k,\ k=1,\ldots,p,\ i=1,\ldots,N.$$

С учетом введенных выше обозначений и замечаний из (11) получим следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=1}^{p}\left[A_{1k}\cdot R_z(t_1,x,y,z_k)\right]+n_1=q(t_1,x,y,z)-q(t_1,x,y,0), \\ \sum\limits_{k=1}^{p}\left[A_{2k}\cdot R_z(t_2,x,y,z_k)\right]+n_2=q(t_2,x,y,z)-q(t_2,x,y,0), \\ \qquad\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \sum\limits_{k=1}^{p}\left[A_{Nk}\cdot R_z(t_N,x,y,z_k)\right]+n_N=q(t_N,x,y,z)-q(t_N,x,y,0), \end{cases} \tag{14}$$

из которой надо определить $R_z(t,x,y,z_k)$.

Из (12) получим соответствующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} \sum\limits_{k=1}^{p}\left[A_{1k}\cdot R_{zz}(t_1,x,y,z_k)\right]+n_1=q(t_1,x,y,z)-q(t_1,x,y,0)-z\cdot R_z(t_1,x,y,0), \\ \sum\limits_{k=1}^{p}\left[A_{2k}\cdot R_{zz}(t_2,x,y,z_k)\right]+n_2=q(t_2,x,y,z)-q(t_2,x,y,0)-z\cdot R_z(t_2,x,y,0), \\ \qquad\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \sum\limits_{k=1}^{p}\left[A_{Nk}\cdot R_{zz}(t_N,x,y,z_k)\right]+n_N=q(t_N,x,y,z)-q(t_N,x,y,0)-z\cdot R_z(t_N,x,y,0), \end{cases} \tag{15}$$

из которой надо определить $R_{zz}(t,x,y,z_k)$.

Систему (14), (15) представим в матричном виде:

$$AR_z+\tilde{n}=\check{q}\,, \tag{16}$$

$$AR_{zz}+\tilde{n}=\hat{q}\,, \tag{17}$$

где $\check{q}(t_i,x,y,z_k)=q(t_i,x,y,z_k)-q(t_i,x,y,0)$,

$\hat{q}(t_i,x,y,z_k)=q(t_i,x,y,z_k)-q(t_i,x,y,0)-z\cdot R_z(t_i,x,y,0)$, $i=(1,2,\ldots,N)$, $k=(1,2,\ldots,p)$.

Для подавления влияния значений белого шума $\tilde{n}(t)$ на значения $R_z(t_k,x,y,z_p)$ и $R_{zz}(t_k,x,y,z_p)$, $k=1,\ldots,N$, можно использовать многошаговый (многократный) фильтр Калмана-Бьюси [6].

Для этого задаем начальные приближения для решения $R_z^{(0)}=R_z(0,x,y,z)$ и матрицы ковариаций ошибок решения $P^{(0)}$. Для их выбора удобно использовать метод регуляризации Тихонова [4], согласно которому

$$R_z^{(0)}=\left(aE+A^TA\right)^{-1}A^Tq\,,\; P^{(0)}=d^2\left(aE+A^TA\right)^{-1}, \tag{18}$$

где E – единичная матрица, $a>0$ – параметр регуляризации, играющий роль неопределенного множителя Лагранжа, $d\ge 0$ – верхняя оценка значения погрешности правой части (16).

Последующие приближения $R_z^{(l)}$ решения R_z системы (14) могут быть найдены по следующей итерационной схеме [6]:

$$R_{zz}^{(l)}=R_{zz}^{(l-1)}+\left(\left(P^{(l-1)}\right)^{-1}+\left(A^{(l)}\right)^T\left(N^{(l)}\right)^{-1}A^{(l)}\right)^{-1}\left(A^{(l)}\right)^T\left(N^{(l)}\right)^{-1}\left(q^{(l)}-AR_{zz}^{(l-1)}\right),\qquad(19)$$

$$P^{(l)}=\left(\left(P^{(l-1)}\right)^{-1}+\left(A^{(l)}\right)^T N^{(l)}A^{(l)}\right)^{-1},\ N^{(l)}=M[\tilde{n}^{(l)}\left(\tilde{n}^{(l)}\right)^T],\ l=1,2,...,L.\qquad(20)$$

Зададим начальные приближения для решения $R_{zz}^{(0)}=R_{zz}(0,x,y,z)$ и матрицы ковариаций ошибок решения $P^{(0)}$. Для их выбора удобно использовать соотношения (18), подставив в них $R_{zz}^{(0)}$ вместо $R_z^{(0)}$.

Последующие приближения $R_{zz}^{(l)}$ решения R_{zz} системы (15) могут быть найдены по итерационной схеме (19)-(20) путем замены $R_{zz}^{(l)}$ на $R_z^{(l)}$.

На практике можно столкнуться с ситуацией, когда обратные матрицы в соотношениях (18)-(20) найти (определить) невозможно (рассматриваемые матрицы могут быть вырожденными). В этом случае вместо обратных матриц следует использовать в (18)-20) псевдообратные, воспользовавшись методом Гревилля построения псевдообратной матрицы [7].

Соотношения (18)-(20) позволяют найти значения величины $R_{zz}^{(L)}$ – оценку R_{zz} с заданной погрешностью $e>0$. Способ нахождения оценки $R_z^{(L)}$ для R_z также подробно описан. Аналогично определяются $R_{xx}^{(L)}$, $R_{yy}^{(L)}$, $R_t^{(L)}$, $R_x^{(L)}$ соответственно для R_{xx}, R_{yy}, R_t , R_x.

Подставляя найденные оценки в (7), получим наилучшую в среднем квадратическом смысле оценку $\breve{K}_1(t_k)$ значения $K_1(t_k)$:

$$K_1(t_k)=\frac{R_t^{(L)}+\dfrac{\partial U}{\partial x}\cdot R_x^{(L)}-\dfrac{\partial w}{\partial z}\cdot R_z^{(L)}-K_x\cdot R_{xx}^{(L)}-\dfrac{\partial K_x}{\partial x}\cdot R_x^{(L)}}{R_z^{(L)}+R_{zz}^{(L)}}+$$

$$+\frac{-K_y \cdot R_{yy}^{(L)} - \frac{\partial Ky}{\partial y} \cdot R_y^{(L)} - K_z \cdot R_{zz}^{(L)} - \frac{\partial K_z}{\partial z} \cdot R_z^{(L)} - Q(t_k)}{R_z^{(L)} + R_{zz}^{(L)}}, \ k = 1,\ldots,N. \qquad (20)$$

3. Пример

Для проверки качества работы алгоритма по указанной методике, воспользуемся экспериментальными данными, взятыми из отчетов Центра лабораторного анализа и технических измерений по Южному Федеральному округу (ЦЛАТИ по ЮФО) и содержащими информацию о выбросах в атмосферу диоксида азота. Согласно этим данным: $Q = \frac{t}{t+1}$ (кг/с), $H = 20$ м, $U = 0{,}5 \ln z$ (м/с), $K_x = K_y = K_0 U$ м^2/с, $K_0 = 0{,}25$ м, $t_0 = 0$ с, $w = 0{,}01$ (м/с).С помощью (20) найдены наилучшие в среднем квадратическом смысле оценки значения вертикальные составляющие коэффициента турбулентной диффузии на промежутке времени $t \in [0;55]$ (вычисления проводились в пакете прикладных программ MatLab). Графическая визуализация результатов проведенных расчетов приведена на рисунке 1.

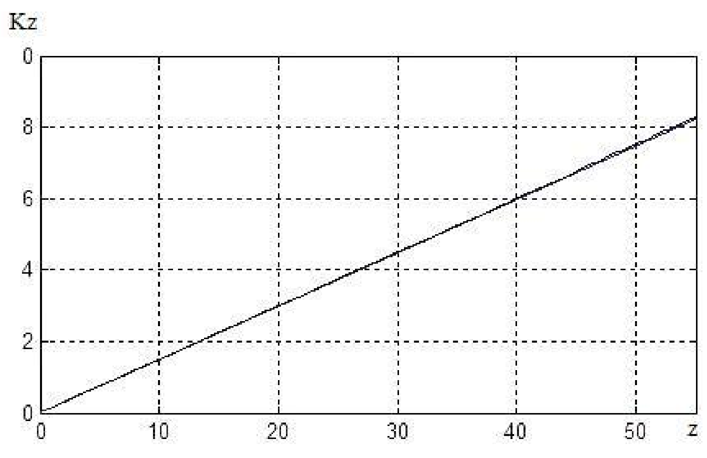

Рисунок 1 – Графическое изображение совпадения значений экспериментальной и расчетной вертикальной составляющей коэффициента турбулентной диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Алоян А.Е.* Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. - М.: Наука, 2008. - 415 с.
2. *Семенчин Е.А., Кармазин В.Н., Калина Н.Н.* О разрешимости некоторых обратных задач для уравнения атмосферной диффузии. Экологический вестник научных центров Черноморского экологического сотрудничества, №4, 2005. – С. 47-51
3. *Семенчин Е.А.* Аналитические решения краевых задач в математической модели атмосферной диффузии. Ставрополь: СКИУУ, 1993. – 141 с.
4. *Берлянд М.Е.* Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеоиздат, 1975. – 448 с.
5. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 142 с.
6. *Сизиков В.С.* Устойчивые методы обработки результатов измерений. Учебное пособие – СПб: Изд-во «СпецЛит», 1999. – 240 с.
7. *Гантмахер Ф.Р.*, Теория матриц. – Москва: изд-во "Физматлит", 2004. – 576 с.