

К ПРОБЛЕМЕ ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ В ЛАГРАНЖЕВЫХ СТОХАСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ

Abstract: For the problem of variational data assimilation in lagrangian stochastic models of pollutants transport the method of control vector reduction is proposed, which improves the efficiency of the numerical solution of the problem of minimizing the cost functional

Key words: data assimilation, atmospheric dispersion, variational methods of minimization.

Анотація: Для задачі варіаційного засвоєння даних вимірювань у лагранжевих статистичних моделях переносу забруднень запропоновано метод редукції контрольного вектора, який дозволяє підвищити ефективність чисельного розв'язку задачі мінімізації функціоналу якості.

Ключові слова: асиміляція даних, атмосферний перенос, варіаційні методи мінімізації.

Аннотация: Для задачи вариационного усвоения данных измерений в лагранжевых статистических моделях переноса загрязнений предложен метод редукции контрольного вектора, который позволяет повысить эффективность численного решения задачи минимизации функционала качества.

Ключевые слова: ассимиляция данных, атмосферный перенос, вариационные методы минимизации.

1. Введение

Как известно, при прогнозировании загрязнения окружающей среды с помощью математических моделей часто возникает задача об уточнении параметров источника загрязнения (местоположение, характеристики выброса) и других параметров модели с помощью имеющихся измерений [1]. Эта так называемая обратная задача рассматривалась в ряде работ, например, [2] – [5]. Причем, методы решения этой задачи, называемой еще задачей усвоения или ассимиляции данных, отличаются как по типам используемых моделей атмосферного переноса (эйлеровы, лагранжевы, лагранжево-эйлеровы [6]), так и по методам усвоения, которые делятся на вариационные, статистические (калмановская фильтрация) и ансамблевые [7]. Наиболее часто все основные методы ассимиляции данных применялись в сочетании с эйлеровыми моделями [2]. Для лагранжево-эйлеровых моделей применялись в основном только статистические или ансамблевые методы [3], и лишь в последнее время, в т.ч. в предыдущих работах автора, вариационные [4], [8], [9]. В случае стохастических лагранжевых моделей переноса для решения обратной задачи до сих пор применялись только ансамблевые методы [5].

Лагранжевы модели обладают рядом преимуществ при описании атмосферного переноса, особенно вблизи источника и в условиях сложной подстилающей поверхности [6]. Такие модели также широко используются для расчета переноса в других средах, например, при моделировании распространения пятна нефти на поверхности моря [10]. Однако применение вариационной ассимиляции данных с этими моделями затруднено тем обстоятельством, что правая часть уравнения движения частиц в этих моделях содержит, помимо средней скорости, стохастическую добавку, которая описывает турбулентную диффузию, тогда как обычные методы вариационной ассимиляции данных основываются на методах теории управления детерминистическими системами [7]. В настоящей работе предложен алгоритм, позволяющий адаптировать методы вариационного усвоения данных, разработанные в предыдущих работах автора [4], [8], [9] для детерминистических лагранжево-эйлеровых моделей к использованию в сочетании с стохастическими лагранжевыми моделями переноса загрязнений. В дальнейшем для большей конкретности будет употребляться термин "атмосферный перенос".

2. Постановка задачи

В отличие от эйлеровых моделей атмосферного переноса, в которых зависимая переменная C – концентрация рассчитывается как функция независимых переменных x, y, z, t – пространственных координат и времени, в случае лагранжевых моделей независимыми переменными являются: x_0, y_0, z_0 – начальные координаты частиц, начальное время t_0 , соответствующее заданию начальных координат, и время t . Добавление начального времени t_0 к зависимым переменным имеет смысл в том случае, когда в среду поступают новые частицы через некоторый источник. Зависимыми переменными являются координаты соответствующих частиц среды X, Y, Z .

Концентрация в некоторой конкретной точке пространства k , $c^k = c(x^k, y^k, z^k)$ вычисляется как некоторый функционал от распределения координат частиц:

$$c^k = \iiint_G F^k(X(t), Y(t), Z(t)) dx_0 dy_0 dz_0 dt_0,$$
 параметрически зависящий от координат

рассматриваемой точки пространства. В случае неподвижного точечного источника начальные координаты частиц можно исключить из списка независимых переменных, и тогда концентрация вычисляется как

$$c^k(x^k, y^k, z^k, t) = \int_0^{T_s} F^k(X(t), Y(t), Z(t)) dt_0, \quad (1)$$

где T_s – время действия источника.

Основное отличие лагранжевых моделей (ЛМ) от лагранжево-эйлеровых моделей (ЛЭМ), рассмотренных в предыдущих работах [4], [8], [9], состоит в том, что в случае ЛЭМ перенос частиц осуществляется только средней скоростью ветра, тогда как турбулентная диффузия, происходящая под влиянием пульсаций ветра, параметризуется зависимостями, характеризующими рост "размеров" частиц (параметров распределения вещества $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ в системе координат, связанной с центром масс частицы). Турбулентная диффузия в ЛМ описывается стохастической добавкой к средней скорости ветра в уравнениях переноса частиц. В случае ЛМ частицы рассматриваются либо как материальные точки, не имеющие размера, либо как физические частицы, размеры которых $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ мало меняются со временем. В последнем случае функция F^r из (1) в лагранжевых и лагранжево-эйлеровых моделях одинакова [12], а к вектору независимых переменных добавляется, кроме координат частицы, еще количество вещества в частице q .

В дальнейшем будем рассматривать полудискретную форму лагранжевых уравнений переноса и для простоты изложения ограничимся случаем точечного источника, хотя представленный алгоритм имеет более общий характер. Тогда, как было указано выше, независимой переменной является время появления частицы $t_0 \in (0, T_s)$. Разобьем интервал, характеризующий время действия источника, на N подынтервалов с шагом τ : $N = T_s / \tau$. Далее

будем рассматривать N частиц со временем появления каждой частицы $t_{0i} = i\tau$. Координаты x_i, y_i, z_i i -й частицы в системе отсчета, связанной с Землей, изменяются вследствие переноса частицы средней и пульсационной составляющими скорости:

$$\frac{dx_i}{dt} = u(\bar{r}_i) + u_i'(t), \frac{dy_i}{dt} = v(\bar{r}_i) + v_i'(t), \frac{dz_i}{dt} = w(\bar{r}_i) + w_i'(t), \quad (2)$$

где \bar{r}_i – радиус-вектор частицы, u_i', v_i', w_i' – флуктуационные компоненты скорости, которые предполагаются независимыми между собой и являются i -ми реализациями марковских случайных процессов. Значения флуктуационных компонент скорости находятся из решения уравнения Ланжевена [13], в котором параметры плотности распределения зависят от характеристик турбулентности в окружающей среде (например, среднеквадратических значений флуктуаций скорости).

Количество вещества в каждой частице может изменяться вследствие процессов осаждения, вымывания, радиоактивного распада и т.д. Поэтому к уравнениям (2) следует добавить уравнение

$$\frac{dq_i}{dt} = -\lambda q_i, \quad (3)$$

которое в общей форме описывает названные процессы.

Начальные условия для уравнений (2) характеризуют начальные координаты частиц, которые в общем случае (например, движущегося источника) могут изменяться. Начальные условия для уравнений (3) описывают начальное содержание вещества в частицах, которое в свою очередь однозначно связано с функцией мощности источника $q^s(t)$. В общем виде начальные условия можно записать следующим образом:

$$\bar{r}_i(t_{0i}) = \bar{r}_{0i}, q_i(t_{0i}) = q_{0i} = q_{0i}^s \tau. \quad (4)$$

Дальнейшая постановка задачи ассимиляции данных повторяет в основных чертах уже рассмотренную в предыдущей работе [9]. Введем вектор контрольных переменных, которые подлежат уточнению в процессе усвоения: $\underline{\psi} = (\underline{\psi}_x, \underline{\psi}_y, \underline{\psi}_z, \underline{\psi}_q)^T$, где, например, $\underline{\psi}_x = (x_{i0}), 1 \leq i \leq N$. То есть для определенности будем считать, что в процессе усвоения уточняются начальные условия задачи (2) – (4).

Для простоты предположим, что интервал моделирования распространения загрязнения совпадает с интервалом действия источника $(0, T_s)$. Предположим также, что в течение этого интервала доступны измерения концентрации от K измерительных станций, и временной шаг измерений без ограничения общности будем полагать равным временному шагу модели между появлением соседних частиц τ . Обозначим измеренную k -й станцией в момент времени t концентрацию $C_k^o(t)$, а вектор длины K , составленный из этих концентраций, обозначим $\underline{C}^o(t)$.

Обозначим концентрацию, рассчитанную с помощью модели для момента времени t через C_k^M , а вектор, составленный из этих концентраций, обозначим $\underline{C}^M(t)$. Заметим, что для расчета концентрации C^M на основании вектора состояния модели используется численная дискретизация формулы (1), в которой конкретный вид функции F^k аналогичен формуле (8) из работы [9] и здесь не приводится, а параметрами этой функции являются координаты точки k .

Будем искать такие начальные условия $\underline{\psi}$, которые минимизируют функционал:

$$I(\underline{\psi}) = \frac{1}{\sigma_b^2} \|\underline{\psi} - \underline{\psi}^B\|^2 + M \left[\frac{1}{\sigma_o^2} \frac{1}{T_s} \int_0^{T_s} \|\underline{C}^o(t) - \underline{C}^M(t)\|^2 dt \right] = I_1 + M [I_2], \quad (5)$$

где $\underline{\psi}^B$ – априорная оценка искомого вектора, σ_b^2 – среднеквадратическая ошибка этой оценки σ_o^2 – среднеквадратическая ошибка измерений, знак $\|\cdot\|$ подразумевает l_2 норму в соответствующем евклидовом пространстве, а M означает математическое ожидание. Первый член функционала (5) характеризует отклонение искомого начальных условий от их априорной оценки, тогда как второй характеризует среднеквадратическое отклонение рассчитанных концентраций от измерений.

3. Метод решения задачи

Поставленная задача относится к категории задач оптимального синтеза (или оптимального управления стохастическими системами). Сложность такого рода задач связана, во-первых, с оценкой целевой функции, которая в общем случае требует многих прогонов модели [14], поскольку, вследствие стохастичности уравнений (1), интеграл I_2 в функционале (5) является случайной величиной.

Покажем, что для рассматриваемых задач атмосферного переноса это обстоятельство можно существенно упростить. Как известно [11], для конкретных реализаций стационарных случайных процессов при известных дополнительных условиях в пределе при $T_s \rightarrow \infty$ средние

$$\bar{C}_k^M = \frac{1}{T_s} \left(\int_0^{T_s} C_k^M(t) dt \right), \bar{C}_k^o = \frac{1}{T_s} \int_0^{T_s} C_k^o(t) dt, \text{ а, следовательно, и соответствующее значение } I_2,$$

сходятся к своим средним значениям. Хотя в атмосфере стационарные процессы в строгом смысле не существуют, тем не менее, согласно [11], "однако и здесь, при рассмотрении мгновенных значений гидродинамических характеристик в течение сравнительно небольших промежутков времени (скажем, порядка нескольких минут или десятков минут) соответствующие случайные функции часто можно считать стационарными".

Поскольку на практике время T_s изменяется от нескольких минут до нескольких часов, мы можем предположить, что интервал $(0, T_s)$ состоит из некоторого конечного числа L таких "промежутков стационарности", на каждом из которых соответствующий интеграл I_2^l (где пределы

интегрирования и интервал осреднения по сравнению с I_2 заменены на пределы соответствующего промежутка l) успевает сходиться (в среднем квадратичном) с некоторой точностью ε_l к своему среднему значению. Можно видеть, что при этих условиях и интеграл I_2 сходится с точностью до некоторой малой величины к своему среднему значению. Действительно, допустим величина рассматриваемых "промежутков стационарности" одинакова, и тогда она равна T_s/L . Обозначим числитель в выражении для I_2 через J_2 : $I_2 = J_2/T_s$. Обозначим также предельное значение для I_2 при $T_s \rightarrow \infty$ через \tilde{I}_2 . Те же обозначения будем применять и к I_2^l .

Тогда, если все $I_2^l \leq \varepsilon_l$, то $\sum_{l=1}^L I_2^l - \sum_{l=1}^L \tilde{I}_2^l = \sum_{l=1}^L \frac{J_2^l L}{T} - \sum_{l=1}^L \tilde{I}_2^l = LI_2 - \sum_{l=1}^L \tilde{I}_2^l \leq L\varepsilon$, где ε – максимальное из всех ε_l . Следовательно, $I_2 - \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \tilde{I}_2^l \leq \varepsilon$. Таким образом, при сделанных

предположениях мы с высокой степенью вероятности можем считать значение I_2 , полученное в результате единичной реализации случайного процесса, описываемого уравнениями (2), близким к своему среднему значению. Поэтому будем пренебрегать этой разницей и в дальнейшем считать, что

$$I(\underline{\psi}) \approx I_1 + I_2. \quad (6)$$

Для нахождения градиента функции $I(\underline{\psi})$ можно применить аппарат сопряженных уравнений, как это делалось в предыдущей работе для лагранжево-эйлеровой модели [8]. Для этого надо считать стохастические добавки к уравнениям движения, не зависящими от координат частиц. Данное допущение, строго говоря, обосновано лишь в случае однородных свойств среды, однако и для неоднородных условий можно считать ошибку, вносимую этим предположением, небольшой. Тогда в ходе прямого решения системы (2)–(3) следует запомнить траектории (случайные) всех частиц, и в ходе решения обратной задачи двигаться обратно по этим траекториям. Однако компоненты градиента функции $\partial I / \partial \psi_j$, найденные таким образом, являются случайными величинами. Поэтому найденный градиент нельзя применять в методе спуска для нахождения минимума. Данное обстоятельство может быть преодолено следующим образом.

Введем обобщенную координату i -й частицы $\tilde{x}_i = (x_i, y_i, z_i, q_i)$, которая вместе с пространственными координатами описывает также и содержание вещества в частице. Допустим, источник движется по некоторой заданной траектории $\tilde{x}_0(t)$ (то есть, заданы как траектория движения источника в пространстве, так и функция зависимости от времени мощности источника). Тогда начальные координаты i -й частицы задаются соотношением $\tilde{x}_{0i} = \tilde{x}_0(\tau i)$. Допустим, что, исходя из физического смысла задачи, в течение некоторого достаточно малого промежутка

времени Δt обобщенную координату траектории источника можно считать неизменной. Таким образом, траектория источника аппроксимируется ступенчатой функцией

$$\tilde{x}_0(t) \approx \tilde{x}_0(m\Delta t), \quad (7)$$

где $m = [t/\Delta t]$ – целая часть от отношения $t/\Delta t$.

Теперь зададим шаг τ между появлением соседних частиц достаточно малым, так чтобы отношение $\Delta t/\tau = P$ было достаточно большим (смысл этого будет ясен ниже). Тогда частицы можно объединить в $\Pi = N/P$ групп по P частиц в каждой группе: $\tilde{x}_0^j = (\tilde{x}_{0(j-1)P+1}, \dots, \tilde{x}_{0jP})$, $1 \leq j \leq \Pi$ так, что каждая группа характеризуется одинаковыми начальными условиями: $\tilde{x}_0^j = \tilde{x}_0(j\Delta t)$ в соответствии со ступенчатой аппроксимацией траектории источника (7).

Введем новый (редуцированный) контрольный вектор, который, вместо начальных характеристик частиц, содержит характеристики групп частиц:

$$\begin{aligned} \underline{\psi}^r &= (\underline{\psi}_x^r, \underline{\psi}_y^r, \underline{\psi}_z^r, \underline{\psi}_g^r)^T, \\ \underline{\psi}_x^r &= (x_0^j), 1 \leq j \leq \Pi, \dots, u \text{ тд.} \end{aligned} \quad (8)$$

Вместо исходной задачи минимизации функционала (5) по отношению к контрольному вектору $\underline{\psi}$ будем решать модифицированную задачу минимизации того же функционала по отношению к $\underline{\psi}^r$. Заметим, что, вследствие введенной ступенчатой аппроксимации траектории источника, значения обоих членов функционала (5) не изменятся при подстановке $\underline{\psi}^r$ вместо соответствующего $\underline{\psi}$.

Легко вычислить градиент функционала $\partial I/\partial \underline{\psi}^r$ через значения градиента $\partial I/\partial \underline{\psi}$, который, в свою очередь, можно вычислить с помощью решения сопряженных уравнений, как обсуждалось выше:

$$\frac{\partial I}{\partial \psi_{xj}^r} = \sum_{l=1}^P \frac{\partial I}{\partial \psi_{x((j-1)P+l)}}. \quad (9)$$

Итак, индивидуальные производные $\partial I/\partial \psi_{x((j-1)P+l)} = \xi_{jl}$ являются случайными величинами, которые можно считать независимыми. Следовательно, при выполнении некоторых дополнительных, не слишком ограничительных условий (конечность вторых моментов и др. [15, с. 351], выполняется центральная предельная теорема (ЦПТ). Фиксируем значение j и обозначим

$\xi_{jl} = \xi_l$, а сумму $\sum_{l=1}^P \xi_l = S_P$. Ограничим рассмотрение случаем одинаково распределенных ξ_l со

значением дисперсии $D\xi_l = D\xi$. Тогда, согласно ЦПТ:

$$P\left(\frac{S_P - M(S_P)}{\sqrt{P}\sqrt{D\xi}} \leq x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-t^2/2} dt = \Phi(x). \quad (10)$$

Теперь оценим, как ведет себя величина $D\xi$ с увеличением P . Для этого следует внимательнее рассмотреть функцию F^k , ставящую в соответствие вектору состояния модели концентрацию в точке k по формуле (1). Конкретный вид этой функции приведен в [9], а для настоящего изложения существенно лишь то, что эта функция линейна по массосодержанию частиц q_i . Причем, как упоминалось выше, $q_i = \tau q_{si}$, где q_{si} – функция мощности источника. То есть, можно записать следующее соотношение:

$$c^k(x^k, y^k, z^k, t) = \tau \sum_{i=1}^N q_{si} f^k(x_i, y_i, z_i), \quad (11)$$

где выражение под знаком суммы уже не зависит от τ . Сопоставляя (11) с (5), можно видеть, что все $\xi_l \sim \tau$, и, следовательно, $\sqrt{D\xi_l} \sim \tau = \Delta t / P$. Подставляя последнее выражение в (10) и обозначив $\sqrt{D\xi}$ при $P=1$ через $(\sqrt{D\xi})_0$, получим

$$P \left(\frac{S_p - M(S_p)}{(\sqrt{D\xi})_0} \leq \frac{x}{\sqrt{P}} \right) = \Phi(x). \quad (12)$$

Из соотношения (12) видно, что увеличение P при фиксированном Δt приводит к сходимости по вероятности S_p к $M(S_p)$. Можно предположить, что это утверждение останется верным и без предположения об одинаковости распределений ξ_l . Достаточно, чтобы только выполнялись условия ЦПТ. Таким образом, вычисленные по формуле (9) градиенты $\partial I / \partial \psi_{xj}^r$ уже можно использовать в процедуре минимизации, поскольку при достаточно большом P таким образом вычисленные градиенты мало отличаются от своих средних значений. Предложенный метод вычисления градиентов в задаче вариационного усвоения данных в лагранжевой стохастической модели переноса загрязнения можно назвать редукцией контрольного вектора (РКВ).

Отметим, что предложенный метод редукции контрольного вектора принципиально отличается от простого вычисления среднего значения градиента $\partial I / \partial \psi_{xj}^r$ по методу Монте Карло (МК). При вычислении градиента по методу МК потребуется несколько прогонов модели с шагом $\tau = \Delta t$. С точки зрения вычислительной эффективности, эта задача эквивалентна задаче одного прогона модели с уменьшенным шагом τ , однако точность таким образом вычисленных полей концентрации может быть существенно ниже, чем в случае РКВ. Если же вычислять градиент целевой функции по методу МК без понижения точности, то понадобится в P раз больше вычислений, чем при вычислениях по методу РКВ. Например, в случае задачи уточнения функции источника эта функция с небольшими потерями для точности вычислений может считаться постоянной в течение достаточно больших промежутков времени ($\Delta t \approx 600 c$), тогда как сложность метеорологических условий может налагать существенно более сильные ограничения на шаг $\tau \sim 1 c$. Это обстоятельство эффективно используется в методе РКВ. Для одной итерации в

алгоритме минимизации оказывается достаточно одного прогона модели, поскольку полученные таким образом значения функционала качества и его градиентов оказываются с большой вероятностью близкими к средним значениям.

5. Выводы

В данной работе обсуждалась задача вариационного усвоения данных измерений в лагранжевых стохастических моделях переноса загрязнений. Предложен метод редукции контрольного вектора, который позволяет по однократному прогону модели вычислять значения функционала качества и его градиентов, близкие к своим средним значениям, что существенно облегчает численное решение задачи минимизации функционала качества.

БЛАГОДАРНОСТИ

Представленная работа выполнялась в рамках реинтеграционного гранта НАТО СВР.NUKR.RIG.982362 "Atmospheric pollution data assimilation for emergency response". Автор выражает признательность сотрудникам греческого Национального исследовательского центра "ДЕМОКРИТОС", доктору Спиросу Андронопулосу и Вассо Тсиури за обсуждение настоящей работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sportisse B. A review of current issues in air pollution modeling and simulation // Computational Geosciences. – 2007. – Vol. 11. – P. 159 – 181.
2. Enting I.G. Inverse Problems in Atmospheric Constituent Transport. – UK: Cambridge University Press, 2002. – 415 p.
3. Assimilating concentration observations for transport and dispersion modeling in a meandering wind field / S.E. Haupt, A. Beyer-Lout, K.J. Long et al. // Atmospheric Environment. – 2009. – Vol. 43, N 6. – P. 1329 – 1338.
4. Ковалец И.В. Уточнение входных данных модели атмосферного переноса путем усвоения измерений в случае постоянной скорости ветра: Сб. тр. Института проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова НАНУ. – 2009. – N 47. – С. 117 – 125.
5. Zheng D.Q., Leung J.K.C., Lee B.Y. Online update of model state and parameters of a Monte Carlo atmospheric dispersion model by using ensemble Kalman filter // Atmospheric Environment. – 2009. – Vol. 43, N 12. – P. 2005 – 2011.
6. Predictions of plume dispersion in complex terrain: Eulerian versus Lagrangian models / K.C. Nguyen, J.A. Noonan, I.E. Galbally et al. // Atmospheric Environment. – 1997. – Vol. 31, N 7. – P. 947 – 958.
7. Evensen G. Data Assimilation. – Berlin: Springer-Verlag, 2007. – 523 p.
8. Improvement of source and wind field input of atmospheric dispersion model by assimilation of concentration measurements: method and applications in idealized settings / I.V. Kovalets, V. Tsiouri, S. Andronopoulos et al. // Applied Mathematical Modelling. – 2009. – Vol. 33, N 8. – P. 3511 – 3521.
9. Ковалец И.В. Усвоение данных измерений в атмосферных моделях СППР: алгоритмы // Математичні машини і системи. – 2007. – № 1. – С. 77 – 87.
10. Brovchenko I.A., Maderich V.S. Oil Dispersion By Breaking Waves And Currents: Modeling of Transport of Spilled Oil in Wind and Wave Driven Sea. – 2005. – Vol. 46, N 4. – P. 17 – 21.
11. Монин А.С., Яглом А.М. Статистическая гидромеханика. – СПб.: Гидрометеоиздат, 1996. – Т. 1. – 696 с.
12. Validation study of the dispersion Lagrangian particle model DIPLOT over complex topographies using different concentration calculation methods / E. Davakis, S. Nychas, S. Andronopoulos et al. // Int. J. of Environment and Pollution. – 2003. – Vol. 20, N 1–6. – P. 33 – 46.
13. Wilson J.D., Sawford B.L. Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in turbulent atmosphere// Boundary Layer Meteorology. – 1996. – Vol. 78, N 1–2. – P. 191 – 210.
14. Моисеев Н.Н. Элементы теории оптимальных систем. – М.: Наука, 1975. – 528 с.
15. Ширяев А.Н. Вероятность. – М.: Наука, 1989. – 640 с.

Стаття надійшла до редакції 22.10.2009