Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2007. – Вип. 2. – С.101-104.

12. Бейко И. В. Численный анализ граф-операторных уравнений методом разрешающих операторов и *s*-экстремальных моделей // II Республиканская конференция “Вычислительная математика в современном научно-техническом прогрессе”. – Киев: КГУ, 1978. – С.124-125.
13. Бейко І. В. Уніфікована методологія розв’язуючих операторів як новітня інформаційна технологія для відшукання нових знань і прийняття оптимальних рішень (англійською мовою) // Proc. “The Information Technology Contribution to the Building of a Safe Regional Environment”, AFCEA, Europe Seminar, Kiev, 28-30 May 1998. – С.44-50.

Numerical high-order methods for solution of multi-dimensional boundary and Cauchy problem are developed by implementation of asymptotic solve-operators.

Key words: *asymptotic solve-operators, boundary/Cauchy problems.*

Отримано: 05.06.2008

УДК 519.711

І. В. Бейко, В. І. Ночвай

Українсько-Угорський інститут кібернетики
та інформаційних технологій, м. Київ

МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ЕМІСІЙНИХ ПРОЦЕСІВ У ПОВІТРЯНОМУ БАСЕЙНІ МІСТА

Побудовано математичні моделі та алгоритми багатокритеріальної оптимізації емісійних параметрів екозабруднення повітряного басейну міста.

Ключові слова: *математичне моделювання, багатокритеріальна оптимізація, забруднення атмосфери, процеси переносу і дифузії.*

Вступ. Задача побудови адекватних математичних моделей процесів розповсюдження забруднюючих речовин (ЗР) в повітряному басейні міста залишається актуальною для оперативного управління параметрами емісії на основі розрахунків оптимальних сценаріїв розповсюдження викидів за наявних метеоумов. Відомі методи комбінації прямого і оберненого моделювання з використанням техніки зворотньої траєкторії в лагранжевих моделях (Persson et al., 1987 [1]); Pragm et al., 1980 [2]; Seibert, 2001 [3]) та спряжених рівнянь в ейлерівських моделях (Марчук Г. І. [4,5], Пененко В. В. [6]), знаходять широке практичне застосування, зокрема і для оцінювання параметрів джерел викидів ЗР в атмосферу (Бакланов, 1986 [7]; Pudykiewicz, 1998 [8], Robertson and Lange, 1998 [9]). В даній роботі використовуються методи розв'язуючих операторів для побудови адекватних моделей і методів багатокритеріальної оптимізації параметрів емісійних процесів у повітряному басейні міста. Адекватні робочі математично-комп'ютерні p-моделі будуються у класі граф-операторних моделей, вершинами яких є робочі моделі підсистем

$$A_k\left(x^k, u^k, p^k, q^k, z^k\right) = 0,\ z^k = Z^k\left(x, u^k, p^k, q^k\right), k = \{1,...,n\},$$

де A_k – параметричний оператор моделі k-ої підсистеми, x^k – концентрація ЗР у k-ій підсистемі, $x = (x^1,\dots, x^n) = x\,(u, p, q)$, u^k – керування k-ю підсистемою, $u = (u^1,\dots, u^n)\in U,$ q^k – внутрішні та зовнішні збурення, $q = (q^1,\dots, q^n)\in Q$, p^k – параметри моделі, $p = (p^1,\dots, p^n)\in P$, Z^k – оператор зв'язків k-ої підсистеми з іншими підсистемами та навколишнім середовищем. Сукупність моделей підсистем складає граф-операторну p-модель $A\,(x, u, p, q, t) = 0$ з невідомими значеннями $q\in Q$. Вирішення проблеми неповних даних $q\in Q$ пов'язане з вивченням залежності розв'язків $x\,(u, p, q)$ і критеріїв оптимальності $B\,(x, u, p, q)$ від невідомих $q,$ а також з відшуканням оптимальних керувань u за умов $q\in Q$.

Постановка задачі. До основних підсистем екосистеми повітряного басейну міста належать підсистеми джерел емісії ЗР, земної поверхні, фізичних та фотохімічних процесів тощо. Задача оптимізації зводиться до відшукання керувань u, які максимізують значення критерію оптимальності $B\,(x, u, p, q)$. Відшукання оптимальних керувань суттєво спрощується при використанні розв'язуючого оператора C [10], який задовольняє рівнянню

$$C(u, p, q, A(x, u, p, q)) = B(x, u, p, q) | u \in U, q \in Q\,.$$

Якщо діаметр множини $\{C\,(u, p, q, 0) \mid q\in Q\}$ не перевищує числа δ, то p-модель $A\,(x, u, p, q) = 0$ називають Вδ-адекватною. Чебишевський центр множини $\{C\,(u, p, q, 0) \mid q\in Q\}$ є оптимальною мінімаксною оцінкою значення $B_u\,(x, u, p, q)$, похибка якої не перевищує $\delta/2$.

Якщо для кожного допустимого значення $u\in U$ існує розв'язок $x\,(u, p, q)$ граф-операторної p-моделі $A\,(x, u, p, q) = 0$, то для оптимальності керування u^* на допустимій множині $u^*\in U$, тобто, для виконання нерівності

$$B_u\left(x\left(u^*, p, q\right), u^*, p, q\right) \geq B_u\left(x(u, p, q), u, p, q\right)$$

при всіх допустимих значеннях $u\in U$, необхідно і достатньо, щоб значення u^* було розв'язком оптимізаційної задачі

$$u^* = \arg\max_{u\in U} C(u, p, q, 0),$$

а для гарантованої в умовах неповних даних оптимальності керування u^{**}, $u^{**}\in U$, яке при всіх значеннях $u\in U$ задовольняє нерівність

$$\min_{q\in Q} B_u\left(x\left(u^{**},p,q\right),u^{**},p,q\right) \ge \min_{q\in Q} B_u\left(x(u,p,q),u,p,q\right),$$

необхідно і достатньо, щоб значення u^{**} було розв'язком оптимізаційної задачі

$$u^{**} = \arg\max_{u\in U}\min_{q\in Q} C(u,p,q,0).$$

Очевидно використання розв'язуючого оператора спрощує алгоритм розв'язування задачі оптимального керування граф-операторною системою $A\,(x, u^{*}, p, q) = 0$, оскільки відшукання розв'язків $u^{*} = \arg\max_{u\in U} C(u,p,q,0)$ та $u^{**} = \arg\max_{u\in U}\min_{q\in Q} C(u,p,q,0)$ не потребує обчислення розв'язків $x\,(u, p, q)$ системи $A\,(x, u, p, q) = 0$ і не потребує також і обчислення значень $B_u(x\,(u, p, q), u, p, q)$.

Для підсистеми перенесення ЗР у атмосфері [4] розв'язуючий оператор будується за допомогою розв'язків спряженого рівняння

$$-\frac{\partial c'^{*}}{\partial t} - div\,\vec{u}\,c'^{*} + \sigma\, c'^{*} - \Delta c'^{*} = p$$

з граничними умовами:

$$\mu\frac{dc'^{*}}{dn} + u_n c'^{*} = 0 \text{ на } \Sigma \text{ при } u_n \ge 0,$$

$$c'^{*} = 0 \text{ на } \Sigma \text{ при } u_n < 0,$$

$$\frac{\partial c'^{*}}{\partial z} = 0, \text{ для } z = H,$$

$$\frac{\partial c'^{*}}{\partial z} = \alpha c'^{*}, \text{ для } z = 0,$$

де
$$\Delta c'^{*} = \frac{\partial}{\partial x}\mu_{xc}\frac{\partial c'^{*}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\mu_{yc}\frac{\partial c'^{*}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}\nu_{zc}\frac{\partial c'^{*}}{\partial z},$$

$$div\,\vec{u}\,c'^{*} = \frac{\partial uc'^{*}}{\partial x} + \frac{\partial vc'^{*}}{\partial y} + \frac{\partial wc'^{*}}{\partial z},$$

μ_{xc}, μ_{yc} – коефіцієнти турбулентної дифузії в горизонтальних напрямках; ν_{zc} – вертикальний коефіцієнт турбулентної дифузії; σ – коефіцієнт хімічної трансформації; u, v, w – складові швидкості вітру (відповідно до напрямків x, y, z). Функція концентрації ЗР, $c'(x,y,z,t)$, пов'язана з $c'^{*}(x,y,z,t)$ тотожністю:

$$\int_0^T dt\int_G pc'dG = \int_0^T dt\int_G pc'^{*}QdG.$$

Якщо критерієм оптимальності ($B_q(c', q, Q, u, \mu, \sigma)$) якості повітря є сумарна концентрація домішок на поверхні землі в зоні k (Y_k), то беручи до уваги рівність

$$B_q\left(c'\left(q, Q, u, \mu, \sigma\right), q, Q\right) = Y_k = \int_0^T dt \int_G pc' dG ,$$

отримуємо розв'язуючий оператор виду

$$C(q, F, c'^*(u, \mu, \sigma), 0) = Y_k = \int_0^T dt \int_G c'^* F dG ,$$

і для виконання нерівності

$$B_q\left(c'\left(q^*, Q, (u, \mu, \sigma)\right), q^*, Q\right) \ge B_q\left(c'\left(q, Q, u, \mu, \sigma\right), q, Q\right)$$

при всіх допустимих значеннях $q \in U$, необхідно і достатньо, щоб значення q^* було розв'язком задачі оптимізації

$$q^* = \arg\max_{q \in Q} C\left(q, Q, c'^*(u, \mu, \sigma), 0\right).$$

За допомогою обчислених значень $c'^*(u, \mu, \sigma)$, які дають інформацію про внесок від джерела з координатами (x, y, z) до концентрації в точці (x_k, y_k, z_k), можемо обчислити матрицю оптимально допустимих значень для регіональних емісійних параметрів q^*.

Основні результати. В задачі оптимізації емісійних параметрів у кожній k-ій зоні задані обмеження на допустимі концентрації j-ї складової ЗР

$$Y_{kj} = \int_0^T dt \int_G c_j'^* Q_j dG \le c_{kj_{доп}}, k = 1,2,..., n;\ j = 1,2,..., m,$$

які апроксимуються нерівностями в сітковій емісійній моделі

$$\sum_{i=1}^{n} Q_i^j c_{ik}^{*j} p_c + \overline{c_k^j} p_c \le c_{k_{доп}}^j .$$

У сітковій емісійній моделі всі міські джерела домішок різної інтенсивності представлені дискретно у відповідних вузлах сітки. Облік емісії викидів для кожного осередку моделі проводиться на сітці Gh: [17×15×21] за допомогою емісійної моделі в ГІС.

Для розв'язання задачі мінімізації максимального відхилення

$$\varphi(Q) = \max_k \left(\sum_{i=1}^{n} Q_i^j c_{ik}^{*j} + \overline{c}_k^j p_c - c_{k_{доп}}^j \right)$$

на множині Ф допустимих значень Q побудовано метод проекції узагальнених градієнтів

$$Q^{k+1} = P_\Phi\left(Q^k - \lambda_k \xi^k\right),$$

де узагальнений градієнт ξ^k визначається умовою
$$\forall Q \;\; \varphi(Q) \geq \varphi\left(Q^k\right) + \left(\xi^k, Q - Q^k\right),$$
$P_\Phi z$ – проекція z на множину Ф.

Із нерівностей $\varphi(Q) \geq \varphi\left(Q^k\right) + \left(\xi^k, Q - Q^k\right)$ та $\left(\xi^k, Q - Q^k\right) > 0$ випливає
$$\varphi\left(Q^{опт}\right) > \varphi\left(Q^k\right) - \left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right), \left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right) \geq \varphi\left(Q^k\right) - \varphi\left(Q^{опт}\right) \geq 0,$$
$$\varphi\left(Q^{опт}\right) + \left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right) \geq \varphi\left(Q^k\right) \geq \varphi\left(Q^{опт}\right).$$

Отже маємо
$$\varphi\left(Q^k\right) \in \left[\varphi\left(Q^{опт}\right), \varphi\left(Q^{опт}\right) + \left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right)\right].$$

Із $\left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right) = 0$ випливає $Q^k = Q^{опт}$. Оскільки $\forall p$ $\left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right) \geq 0$, то для доведення збіжності достатньо довести, що $\left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right) \to 0$ при $k \to \infty$. Беручи до уваги нерівності
$$\left\|Q^{k+1} - Q^{опт}\right\|^2 = \left\|Q_\Phi\left(Q^k - \lambda_k^* \xi^k\right) - Q^{опт}\right\|^2 \leq \left\|Q^k - \lambda_k^* \xi^k - Q^{опт}\right\|^2 =$$
$$= \left\|Q^k - Q^{опр}\right\|^2 - 2 * \lambda_k^* \left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right) + \lambda_k^{2*} \left\|\xi_k\right\|^2$$
із припущення існування такого $\varepsilon > 0$, що на підпослідовності Q^k для всіх k виконується нерівність $\left(\xi^k, Q^k - Q^{опт}\right) \geq \varepsilon > 0$ випливає, що при $\lambda_k \xrightarrow[k \to \infty]{} 0$ знайдеться такий номер $\bar{k}$, що $\forall k \geq \bar{k}$ $\lambda_k \leq \dfrac{\varepsilon}{C}$, де C – задана константа. Тоді $\forall k \geq \bar{k}$ маємо:
$$\left\|Q^{k+1} - Q^{опт}\right\|^2 \leq \left\|Q^k - Q^{опт}\right\|^2 - 2 * \lambda_k^* \varepsilon + \lambda_k^{2*} C \leq$$
$$\leq \left\|Q^k - Q^{опт}\right\|^2 - \lambda_k^* \left(2 * \varepsilon - \lambda_k^* C\right) \leq \left\|Q^k - Q^{опт}\right\|^2 - \lambda_k^* \varepsilon.$$

Ця нерівність є вірною і для $k = \bar{k}$, тобто маємо:
$$\left\|Q^{\bar{k}+1} - Q^{опт}\right\|^2 \leq \left\|Q^{\bar{k}} - Q^{опт}\right\|^2 - 2 * \lambda_k^* \varepsilon + \lambda_k^{2*} C \leq$$
$$\leq \left\|Q^{\bar{k}} - Q^{опт}\right\|^2 - \lambda_k^* \left(2 * \varepsilon - \lambda_k^* C\right) \leq \left\|Q^{\bar{k}} - Q^{опт}\right\|^2 - \lambda_k^* \varepsilon.$$

Далі маємо
$$\left\|Q^{\bar{k}+2} - Q^{опт}\right\|^2 \leq \left\|Q^{\bar{k}+1} - Q^{опт}\right\|^2 - \lambda_{k+1}^* \varepsilon \leq \left\|Q^{\bar{k}} - Q^{опт}\right\|^2 - \lambda_k^* \varepsilon - \lambda_{k+1}^* \varepsilon.$$

Тобто, для всіх M виконуються нерівності

$$\left\| Q^{\bar{k}+M+1} - Q^{onm} \right\|^2 \le \left\| Q^{\bar{k}} - Q^{onm} \right\|^2 - \sum_{i=\bar{k}}^{M+\bar{k}} \lambda_i^* \varepsilon = \left\| Q^{\bar{k}} - Q^{onm} \right\|^2 - \varepsilon * \sum_{i=\bar{k}}^{M+\bar{k}} \lambda_i \ .$$

Звідси випливає, що додатна величина $\left\| Q^{\bar{k}+M+1} - Q^{onm} \right\|^2$ прямує до $-\infty$ при $M \to \infty$. Отримане протиріччя доводить, що $\left(\xi^k, Q^k - Q^{onm}\right) \to 0$ при $k \to \infty$. Отже, збіжність по функціоналу доведена. У випадку квазідиференційованої функції використовуємо квазіградієнти ξ функції $\varphi(Q)$, які у точці $Q = Q^k$ задовольняють нерівностям

$$\varphi(Q) \ge \varphi\left(Q^k\right) + \left(\xi, Q - Q^k\right) + o\left(\left\| Q - Q^k \right\|\right).$$

У цьому випадку збіжність забезпечують умови

$$\lambda_k \ge 0,\ \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \infty,\ \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 < \infty,\ \frac{\lambda_{k+1}}{\lambda_k} \underset{k\to\infty}{\to} 1 \ .$$

У задачі Г. І. Марчука [4] критерії економічної ефективності підприємств оцінюються функціоналом $I = \sum_{i=1}^{n} \xi_i (Q_i^* - Q_i) = \min;$ де Q_i^* – початковий, а Q_i – досягнутий плановий рівень викидів в атмосферу; ξ_i визначає інвестиції в технології для збереження рівня продуктивності підприємства на одиницю зниження викидів. До інших критеріїв оптимальності належить також прибутковість підприємства $J = \sum_{i=1}^{n} \Psi_i(P_i) = \max$, яка залежить від потужності його роботи P. У випадку лінійної залежності $J = \sum_{i=1}^{n} \chi_i P_i$, $P_i = k_i Q_i$ при обмеженнях $0 \le Q_i \le Q_i^{\max}$ приходимо до задачі лінійного програмування.

В умовах багатокритеріальності вводиться узагальнений критерій (як сума зважених втрат для всіх цільових функцій)

$$F(x) = \sum_{i=1}^{n} \rho_i w_i(x) \to \min,$$

який мінімізуємо на множині допустимих альтернатив:

$$\rho_i w_i(x) \le k_{0\min}, i = 1..n, x \in A,$$

Обмеження на допустиму концентрацію задаємо штрафними функціями

$$F(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n)=f(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n)+H_j(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n),$$

$$f(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n)=\sum_{i=1}^{n}\rho_i w_i(x),$$

$$H_j(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n)=\sum_k \alpha_k\delta_{kj}(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n),$$

$$\delta_{kj}=\frac{Y_k^j}{c^j_{k_{доп}}}.$$

Штрафні коефіцієнти

$$\alpha_k(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n)=\begin{cases}0, & \text{якщо } \delta_{kj}(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n)\le 1\\ \alpha, & \text{якщо } \delta_{kj}(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n)>1\end{cases}$$

визначаємо за формулою Ерроу-Гурвіца [11, 12]

$$\alpha_k^{(n)}=\max\left\{0;\ \alpha_k^{(n-1)}+r\delta_{kj}\right\},$$

де $r>0$ – деяка константа. Координати наступної точки обчислюємо за формулою

$$Q_i^{(k+1)}=\max\left\{0; Q_i^k+\left[\lambda'\nabla_{Q_i}I+\lambda''\nabla_{Q_i}J+\sum_k\alpha\lambda\nabla_{Q_i}\delta_{kj}\left(Q_1,Q_2,\ldots,Q_n\right)\right]\right\}.$$

У випадках значної мінливості параметрів емісії задача зводиться до задачі динамічного програмування

$$J=\sum_{t=1}^{48}\sum_{i=1}^{n}\chi_i k_i Q_i^t=\max;$$

$$\sum_{i=1}^{n}Q_{1i}^j c_{ik}^j\left(t_2\right)p_c+\bar{c}_k^j p_c+\sum_{i=1}^{n}Q_{2i}^j c_{ik}^j\left(t_1\right)p_c\le c^j_{k_{доп}}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\sum_{i=1}^{n}Q_{1i}^j c_{ik}^j\left(t_N\right)p_c+\bar{c}_k^j p_c+\sum_{i=1}^{n}Q_{2i}^j c_{ik}^j\left(t_{N-1}\right)p_c+\ldots$$

$$\ldots+\sum_{i=1}^{n}Q_{Ni}^j c_{ik}^j\left(t_1\right)p_c\le c^j_{k_{доп}}.$$

Висновки. Запропоновані алгоритми реалізовані для 2 та 3-вимірних моделей розрахунку розповсюдження ЗР в атмосфері. Представлена оптимізаційна модель дозволяє використовувати методи прямого та оберненого моделювання процесів розповсюдження домішок в атмосфері міста за різних метеоумов у відшуканні оптимальних емісійних сценаріїв для лінійних та нелінійних критеріїв оптимальності. Модель може використовуватися спільно з прогностичною мезометеорологічною моделлю розрахунку поля вітру та коефіцієнтів турбулентної дифузії з урахуванням хімічних перетворень ЗР.

Список використаних джерел:

1. The Chernobyl accident: A meteorological analysis of how radionuclides reached and were deposited in Sweden / Persson C., Rodhe H., and De Geer, L.E. s.l. – Ambio, 1987. – Vol. 16. – P.20-31.
2. Regional source quantification model for sulfur oxides in Europe / Pragm L.P., Conradsen K., and Nielsen. L.B. – Atmos. Env., 1980. – Vol. 14. – P.1027-1054.
3. Inverse modelling with a Lagrangian particle dispersion model: application to point relieases over limited time intervals / Seibert, P. [ed.] Gryning and Schiermeier (eds.):. s.l. : Air pollution modeling and its application XIX Plenum. – NY, 2001. – P.381-389.
4. Марчук Г .И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
5. Марчук Г. І. Зв'язані рівняння і аналіз складних систем. – М.: Наука, 1992. – 335 с.
6. Пененко В. В., Алоян А. Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. – Новосибирск: Наука, 1985. – 256 с.
7. Baklanov A. Numerical modelling for normalisation of atmospheric environment on industrial sites // Numerical solution of atmospheric hydrothermodynamics problems. s.l. – Novosibirsk: Computing Centre RAS, 1986. – P.30-38.
8. Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters / Pudykiewicz, J.A. // Atmos. Environ. – 1998. – Vol. 32. – P.3039-3050.
9. Source function estimate by means of a variational data assimilation applied to the ETEX-I tracer experiment / Robertson L. // Lange, J. 32, 1998, Atmos. Eviron. – P.4219.
10. Бейко И. В., Бублик Б. Н., Зинько П. Н. Методи і алгоритми вирішення задач оптимізації. – К.: Вища школа, 1983. – 512 с.
11. Эрроу Дж., Гурвиц Л., Удава Х. Исследования по линейному и нелинейному программированию. – М.: ИЛ, 1962.
12. Акулич И. Л. Математическое программирование в примерах и задачах. – М.: Высш. шк., 1986. – 319 с.

Mathematical models and multi-criteria optimization algorithms are designed for optimization of industrial emission parameters of atmospheric pollution in urban areas.

Key words: *mathematical modelling, multi-criteria optimization, air pollution, dynamic and mixture processes.*

Отримано: 05.06.2008