

ПРОЦЕДУРА ОЦЕНКИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ И НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ БОКСОВОЙ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ В МОРЯХ

А.Н. Ершов, Д.А. Камаев, О.В. Шершаков

Научно-производственное объединение «Тайфун», г. Обнинск



Настоящая работа посвящена разработке процедуры оценки чувствительности и неопределенности для боксовой модели морского переноса загрязнений. При оценке чувствительности модели по отношению к малым возмущениям входных данных и параметров использовался переход к сопряженной системе уравнений.

Задача оценки неопределенности результатов моделирования, обусловленной неточным знанием параметров и входных данных модели, в прямой постановке сводится к трудоемкой задаче нахождения глобальных экстремумов. В отношении боксовой модели такой подход не применим из-за большой размерности пространства параметров. В работе приводится процедура получения консервативных оценок неопределенности на основе метода интервальных вычислений. Приводятся результаты расчетов, иллюстрирующие эффективность предлагаемой процедуры оценки неопределенности.

ВВЕДЕНИЕ

Детальное моделирование процессов переноса загрязнений в морях традиционно проводится на основе гидродинамических моделей, которые эффективны для коротких расстояний и небольших интервалов времени. Однако при моделировании нередко возникает необходимость охвата больших расстояний (более 1000 км) на больших временных отрезках (до нескольких столетий). В этих случаях применение сложных гидродинамических моделей не оправдано ни по показателям затрат, ни по точности получаемых результатов. Указанная ситуация имеет место, например, в проблеме радиоактивного загрязнения северных морей. В случае неэффективности гидродинамических моделей для моделирования переноса загрязнений в морях широко используется боксовая модель (бокс-модель) [1-2]. В рамках этой модели рассматривается перенос загрязняющих веществ между различными частями (боксами), на которые разделена морская среда. Считается, что внутри каждого бокса мгновенно происходит равномерное перемешивание загрязняющих веществ.

При использовании модели необходимо иметь оценку чувствительности модели по отношению к малым возмущениям ее входных данных и параметров, а также оценку неопределенности результатов моделирования, обусловленную неточным знанием параметров и входных данных модели. Настоящая работа посвящена разработке проце-

© А.Н. Ершов, Д.А. Камаев, О.В. Шершаков, 2001

дуры оценки чувствительности и неопределенности для бокс-модели морского переноса загрязнений.

При оценке чувствительности модели по отношению к *малым* возмущениям входных данных и параметров эффективным приемом является переход к сопряженной системе уравнений.

Задача оценки неопределенности результатов моделирования, обусловленной неточным знанием параметров и входных данных модели, в прямой постановке сводится к трудоемкой задаче нахождения глобальных экстремумов. В отношении бокс-модели такой подход не применим из-за большой размерности пространства параметров. В работе приводится процедура получения *консервативных* оценок неопределенности на основе метода интервальных вычислений.

БОКС-МОДЕЛЬ МОРСКОГО ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ

Морской перенос загрязнений в бокс-модели описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dA_i}{dt} = \sum_{j=1}^n k_{ji}(t)A_j - \sum_{j=1}^n k_{ij}(t)A_i - k_i(t)A_i + Q_i(t), \quad (1)$$

$$i = 1, 2, \dots, n,$$

где $A_i(t)$ – концентрация загрязнений в боксе с номером i в момент времени t ; $k_{ij}(t)$ – коэффициенты обмена (переноса) между боксами i и j ; $k_i(t)$ – суммарный коэффициент осаждения в боксе i , учитывающий процессы выпадения и радиоактивного распада; $Q_i(t)$ – величина мощности источника загрязнений в боксе i .

Систему уравнений (1) можно записать в матричной форме:

$$\frac{dA}{dt} = K(t)A + Q(t), \quad (2)$$

где $A(t) = (A_1(t), \dots, A_n(t))^T$; $Q(t) = (Q_1(t), \dots, Q_n(t))^T$; $K(t)$ – матрица, определяемая коэффициентами $k_{ij}(t)$ и $k_i(t)$, $i, j = 1, \dots, n$. Индекс T обозначает транспонирование.

Для однозначного определения величины $A_i(t)$ из системы (2) необходимо задать начальное распределение загрязнений $A(t_0) = B$. Всюду в дальнейшем компоненты векторов $A(t_0)$ и $Q(t)$ будем называть данными модели, а элементы матрицы $K(t)$ – параметрами. Временная зависимость данных и параметров предполагается кусочно- постоянной, т.е. существует набор временных отрезков, на каждом из которых $K(t)$ и $Q(t)$ постоянны.

ФУНКЦИОНАЛЫ РИСКА

При использовании бокс-модели для оценки экологической обстановки представляют интерес значения различных функционалов от решения уравнения (2) – так называемых функционалов риска.

В общем случае линейный “функционал риска” можно представить в виде

$$J = (\omega, A(s)) + \int_0^s (\Omega(t), A(t)) dt, \quad (3)$$

где круглые скобки обозначают скалярное произведение. Вектор ω , вектор-функция $\Omega(t)$ и момент времени s определяют тип функционала.

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ БОКС-МОДЕЛИ МОРСКОГО ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ

Оценить чувствительность бокс-модели по отношению к входным данным и параметрам означает построить процедуру вычисления возмущения функционала риска J при возмущении входных данных и параметров. Кроме того, необходима процедура выявления тех параметров и данных модели, возмущение которых наиболее существенно влияет на изменение значения функционала J .

Для получения удобного выражения для возмущения функционала риска вида (3) обычно используется решение $A^*(t)$ сопряженной задачи:

$$-\frac{dA^*}{dt} = K^T A^* + \Omega(t), \quad A^*(s) = \omega. \quad (4)$$

Векторы ω , $\Omega(t)$ в точности совпадают с соответствующими векторами формулы (3). Предположив, что входные данные и параметры возмущены, вместо B , $Q(t)$, K имеем

$$\tilde{B} = B + \delta B, \quad \tilde{Q}(t) = Q(t) + \delta Q(t), \quad \tilde{K}(t) = K(t) + \delta K(t). \quad (5)$$

Следуя [3], нетрудно получить формулу для вариации функционала (3):

$$\delta J = \tilde{J} - J = \int_0^T (\delta K A(t), A^*(t)) dt + \int_0^T (\delta K \delta A(t), A^*(t)) dt + (\delta B, A^*(0)) + \int_0^T (\delta Q(t), A^*(t)) dt \quad (6)$$

Если возмущение параметров модели мало, то второе слагаемое в (6) имеет более высокий порядок малости, чем первое слагаемое, и его можно отбросить и получить упрощенную формулу для вариации функционала.

В соответствии с формулой (6) вариация функционала риска определяется вектор-функцией $A^*(t)$, являющейся решением невозмущенной сопряженной системы уравнений (4). Входные данные для сопряженной системы уравнений определяются видом функционала риска. Вектор-функцию $A^*(t)$ естественно назвать *функцией значимости возмущений* для функционала риска J . Знание этой функции позволяет выделить коэффициенты переноса между боксами, по отношению к которым модель наиболее чувствительна при вычислении значения данного функционала риска.

Смысл функции значимости можно пояснить следующим образом. Пусть в момент времени t_0 в боксе с номером i произошел импульсный выброс загрязняющего вещества массы q . В терминах бокс-модели это означает, что

$$\delta Q(t) = (0, \dots, 0, \delta Q_i(t), 0, \dots, 0),$$

$$\delta Q_i(t) = q \Delta(t - t_0),$$

где $\Delta(t)$ – дельта-функция. В соответствии с формулой (6) имеет место соотношение

$$\delta J \cdot q^{-1} = A_i^*(t_0). \quad (7)$$

Таким образом, компонента функции значимости с номером i равна изменению функционала риска на единицу массы попавшего загрязняющего вещества в боксе с номером i . Аналогичная интерпретация компонент функции значимости имеет место в случае возмущения начального распределения загрязняющего вещества.

Иначе интерпретируется функция значимости в случае возмущения параметров модели. Пусть матрица δK имеет вид $\delta K = p e(i, j)$, $|p| \ll 1$, матрица $e(i, j)$ имеет единственный ненулевой элемент. Этот элемент равен единице и имеет индексы (i, j) . В данном случае

$$\delta J \cdot p^{-1} = \int_0^T A_i(t) A_j^*(t) dt. \quad (8)$$

Следовательно, относительное изменение функционала риска при возмущении параметра модели K_{ij} определяется произведением соответствующих компонент невозмущенного решения исходной системы (2) и сопряженной системы (4). Величину в правой части равенства (8) естественно назвать *степенью чувствительности модели от коэффициента K_{ij}* .

ПРОЦЕДУРА ОЦЕНКИ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ БОКС-МОДЕЛИ МОРСКОГО ПЕРЕНОСА ЗАГРЯЗНЕНИЙ

Неопределенность результатов моделирования обусловлена неточным знанием входных данных и параметров модели. По входным данным рассматриваемая модель переноса является линейной. Ее неопределенность по отношению к входным данным нетрудно вычислить, воспользовавшись формулой (6). Иначе обстоит дело в случае оценки неопределенности бокс-модели по отношению к параметрам. Каждый из коэффициентов обмена известен с определенной точностью, т.е. представляет собой любое число из некоторого интервала возможных значений. В точной постановке задача вычисления неопределенности бокс-модели есть задача нахождения максимального и минимального значений компонент решения системы уравнений (1) на множестве возможных значений коэффициентов обмена. Эта задача сложна по следующим причинам: во-первых, решение системы уравнений (1) нелинейным образом зависит от параметров; во-вторых, велика размерность пространства параметров, например, в одном из вариантов модели NRPA – 1999 [2] число боксов 77, число независимых коэффициентов обмена 174.

Задачу оценки неопределенности бокс-модели по отношению к параметрам можно упростить, ограничившись поиском консервативных оценок компонент решения системы уравнений (1). Для решения упрощенной задачи оценки неопределенности был использован метод интервальных вычислений [4]. Идея интервальных вычислений состоит в следующем. Число представляется в памяти вычислительной машины не одним, а двумя машинными числами - оценкой снизу и оценкой сверху, образующими интервальное число. Арифметические операции над этими числами выполняются так, что если $[a_1, a_2] = [b_1, b_2] * [c_1, c_2]$ то для любых $b \in [b_1, b_2]$ $c \in [c_1, c_2]$ имеет место $b * c \in [a_1, a_2]$, где $*$ $\in \{x, /, +, -\}$. Формальное переопределение всех арифметических операций как интервальных автоматически превращает любой алгоритм в интервальный.

Интервальные вычисления дают возможность учесть неопределенности в исходных данных и параметрах модели, а также погрешности, вызываемые машинными округлениями. В результате интервальных вычислений получаются *консервативные* (верхняя и нижняя) оценки решений системы уравнений боксовой модели. Классический метод интервальных вычислений [4] может приводить к слишком грубым оценкам, поэтому в настоящей работе был использован метод апостериорных интервальных вычислений [5], позволяющий получать более реалистичные оценки.

Приводимый ниже алгоритм предназначен для численного интегрирования системы уравнений вида (2) и был использован в настоящей работе. Предполагается, что матрица $K(t)$ и вектор $Q(t)$ являются кусочно-постоянными, т.е. существует конечное число отрезков, на которых $K(t)$ и $Q(t)$ постоянны. Очевидно, исходная задача численного интегрирования системы (2) с переменными во времени параметрами и данными сводится к задаче с постоянными K и Q на каждом из отрезков их постоянства, поэтому достаточно рассмотреть алгоритм решения задачи (2) с постоянными K, Q . В основу рас-

сматриваемого алгоритма численного интегрирования системы (2) положено следующее представление ее решений:

$$A(t) = e^{(t-t_0)K} A(t_0) + \int_{t_0}^t e^{(t-s)K} Q ds. \quad (9)$$

Следовательно, для построения алгоритма необходимо иметь эффективную (по точности и быстродействию) процедуру вычисления матричной экспоненты. Матричная экспонента вычислялась в результате последовательного возведения в степень:

$$C_1 = C_2, C_2 = C_1^2 = C_2^2, C_3 = C_2^2 = C_2^3, \dots, C_p = C_{p-1}^2 = C_2^p = e^{\tau K},$$

где $C_0 = E + \frac{T}{2p} K$. Число p подбирается так, чтобы $e^{\frac{T}{2p} K} \approx E + \frac{T}{2p} K$, E - единичная матрица. Приведенное приближенное представление матричной экспоненты обеспечивает требуемый баланс водной массы при численном интегрировании. Величина параметра p в процессе счета оценивается исходя из требуемой точности аппроксимации решения системы уравнений (2).

ОЦЕНКА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ И НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ БОКС-МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА

Приводятся результаты применения разработанных процедур для оценки чувствительности и неопределенности бокс-модели переноса. При расчетах использовалась база данных модели NRPA - 2000 (подробно см. [2]). Для упрощения задачи не учитывались осаждение радионуклидов и процессы в донных отложениях. Расчеты проводились для следующего сценария. В Ирландском море произошел мгновенный выброс 1ТБк ^{99}Tc . Начальное распределение радионуклидов

$$A_i(0) = \begin{cases} 0 & , i \neq 69 \\ 1 \text{ Е} + 12 \text{ Бк} & , i = 69 \end{cases} \quad (69 - \text{номер бокса, соответствующего Ирландскому морю}).$$

Источники $Q_i = 0$, $i = \overline{1, n}$, коэффициент полураспада ^{99}Tc $\lambda = 3.3 \text{ Е} - 6$ (1/год). Прогноз производился на 20 лет. Решение системы (2) находилось при помощи приведенного алгоритма с шагом в один месяц с относительной погрешностью 0,01. Далее всюду результаты расчетов приводятся для Норвежского моря.

Анализ чувствительности бокс-модели относительно коэффициентов переноса для Норвежского моря

Выявляются наиболее чувствительные коэффициенты переноса для Норвежского моря на основе вычисления функции значимости возмущений для решения системы уравнений (1) и степени чувствительности от коэффициента. В данном случае функционал риска имеет вид

$$J = A_{32}(t_0) = \int_0^T (\Omega(t), A(t)) dt,$$

где T - максимальное время, на которое осуществляется прогноз;

$$\Omega(t) = \begin{cases} 0, & i \neq 32 \\ \delta(t - t_0), & i = 32 \end{cases},$$

$\delta(t)$ - дельта-функция; t_0 - момент времени, для которого исследуется значение активности A_{32} ; 32 - номер бокса, соответствующего Норвежскому морю (Norwegian Sea,

upper). Анализ чувствительности модели осуществлялся при $T=100$ лет и $t_0=5, 10, 20, 100$ лет. Проведенные вычисления позволяют утверждать, что степень чувствительности от коэффициентов зависит от момента времени t_0 . Так, например, самым чувствительным коэффициентом при прогнозе на $t_0=5$ и 10 лет является $K_{32,38}$ (Norwegian.Sea, upper – Faroe Chaael), при $t_0=20$ лет – $K_{32,33}$ (Norwegian.Sea, upper – Norwegian.Sea, lower), а при $t_0=100$ лет – $K_{49,47}$ (Western Europe Basin – Central North Atlantic).

Оценка неопределенности прогноза на основе метода интервальных вычислений

При исследовании неопределенности модели необходимо рассматривать возмущения матрицы коэффициентов K , однако допустимы не всякие возмущения. Для коэффициентов возмущенной матрицы должны выполняться соотношения, обеспечивающие баланс водной массы для каждого бокса. В рассматриваемом случае эти соотношения представляют собой систему из 77 линейных уравнений. Таким образом, при введении возмущений часть коэффициентов переноса можно считать независимыми, а значения остальных определять на основе упомянутой системы линейных уравнений.

Исследование неопределенности бокс-модели проводилось по следующей схеме. Задавалась относительная погрешность Δ коэффициентов переноса k_{ij} из некоторого набора независимых коэффициентов. Далее коэффициенты из этого набора переопределялись как интервальные коэффициенты переноса: $k_{ij} := [(1 - \Delta)^{k_{ij}}, (1 + \Delta)^{k_{ij}}]$. Затем проводилось численное интегрирование системы уравнений (2) на основе интервальной версии алгоритма. В результате получалось интервальное решение

$$A(t) = (A_1(t), \dots, A_n(t))^T; \quad A_i(t) = [A_i^-(t), A_i^+(t)] \quad , i = \overline{1, n} \quad ,$$

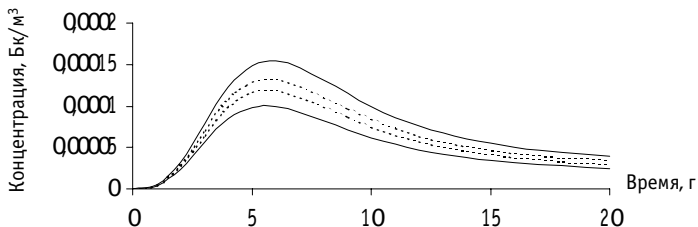


Рис.1. Концентрация ^{99}Tc в Норвежском море ($\text{Бк}/\text{м}^3$) при мгновенном выбросе 1 ТБк ^{99}Tc в Ирландское море. Сплошные кривые - интервальное решение, полученное при внесении относительной погрешности $\Delta=10\%$ во все независимые коэффициенты переноса для Ирландского моря (их число равно 2), пунктирные - решение при внесении относительной погрешности $\Delta=5\%$ во все независимые коэффициенты переноса для Ирландского моря. В целом неопределенность внесена в 4 коэффициента переноса

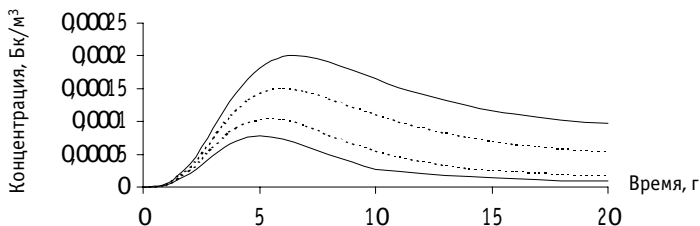


Рис. 2. Концентрация ^{99}Tc в Норвежском море ($\text{Бк}/\text{м}^3$) при мгновенном выбросе 1 ТБк ^{99}Tc в Ирландское море. Сплошные кривые - интервальное решение, полученное при внесении относительной погрешности $\Delta=10\%$. Пунктирные кривые - интервальное решение, полученное при внесении относительной погрешности $\Delta=5\%$. Возмущение одновременно вносилось во все независимые коэффициенты переноса для Ирландского моря, во все независимые коэффициенты для Северного моря, в коэффициенты переноса из Западного Карского моря в Восточное, из Норвежского моря в Гренландское, из Норвежского моря (нижние слои) в Норвежское море (верхние слои). В целом неопределенность внесена в 25 коэффициентов переноса. Для некоторых коэффициентов относительная погрешность достигала соответственно 90 и 40%

где $A^+(t)$ - верхняя и $A^-(t)$ - нижняя консервативные оценки решения системы уравнений (1). Результаты расчетов, иллюстрирующие эффективность предлагаемой процедуры оценки неопределенности, представлены на рис. 1 и 2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Эффективным инструментом исследования чувствительности бокс-модели по отношению к *малым* возмущениям параметров и данных модели является сопряженное уравнение. Его решение – *функция значимости возмущений* – позволяет получить глобальную (в смысле малых возмущений сразу всех параметров и данных модели) картину чувствительности боксовой модели переноса.

Решение задачи оценки неопределенности результатов моделирования в точной постановке затруднительно из-за чрезвычайно большого объема вычислений. Практически приемлемые *консервативные* оценки неопределенности можно получить на основе метода интервальных вычислений или его модификаций [5], [6].

Авторы выражают благодарность М.П. Коломееву за помощь в работе и рецензенту за ряд полезных замечаний.

Литература

1. Nielsen S.P., Iosjpe M. Collective doses to man from dumping of radioactive waste in the Arctic sea. The science of the total Environmental. 202, № 1-3, 135-146, 1997.
2. Iosjpe M., Strand P. Operational Box Model for Radiological Assessment of Consequences from Releases into Marine Environment.- ARTICMAR, June 2000, Contract IC 15-CT98-0209.
3. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1989.
4. Алефельд Г., Херцбергер Ю. Введение в интервальные вычисления.- М.: Мир, 1987.
5. Матиясевич Ю.В. Вещественные числа и ЭВМ//Кибернетика и вычислительная техника. - 1986. - Вып.2. - С.104-133.
6. Hansen E. A generalized interval arithmetic//Lect. Notes Computer Sci. – 1975. - V.29.- P. 7-18.

Поступила в редакцию 9.11.2000

of fine - film multilayer structures (hundred thousands of layers) which consist of fissile and structural materials. The conversion efficiency is up to 30 %.

In the paper consideration is given to a cell - converter of uranium fission fragments energy into electric energy, based on which the EGE has been designed. Besides, one of the options of «cold» reactor - converter is described as well as some calculational and experimental studies are indicated. They are required for the further development of design and for perfection of methods for calculation of proposed reactor -converter parameters.

УДК 504.064+504.423

Procedure of Sensitivity and Uncertainty Estimation for the box Model of Pollution Transport by Sea \ A.N. Ershov, D.A. Kamaev, O.V. Shershakov; Editorial board of Journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy, Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 2001. - 7 pages, 6 illustrations.- References, 6 titles.

The present work is devoted to elaboration of the procedure of sensitivity and uncertainty estimation for the box model of pollution transport by sea. For sensitivity estimation of the model relatively to small perturbations of input data and parameters, the transition to conjugated system of equations have been used. The problem of uncertainty estimation of modeling, caused by inexact knowledge of model parameters and input data. This problem removes to laborious problem of global optimization. In respect to the box model such approach is inapplicable, because of large dimension of parameters space. There is shown the procedure of finding conservative estimates of uncertainty in the work, based on interval mathematics. There are demonstrated the results of computations, illustrating the efficiency of suggested procedure of uncertainty estimation.

УДК 504.4:621.039

The Modeling of the Radionuclide Transportation in Reservoirs Located in the Head Part of the East Ural Radioactive Trace \ P.M.Stukalov, A.I.Smagin; Editorial board of Journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy, Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 2001. - 8 pages, 3 illustrations.- References, 7 titles.

It is presented the results of modeling for the radioactive contamination dynamics of the reservoirs located in the East Ural trace head part. The satisfactory comparison of experimental data and calculated results is shown.

УДК 621.039.73

Estimation of the research light water reactor release influence on the population exposure \ M. Moniri, V.E. Cherkashin; Editorial board of Journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy, Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 2001. - 7 pages, 2 illustrations, 6 tables.- References, 8 titles.

The preliminary results of the calculation of the population irradiation dose values are presented during the normal operation and the hypothetical design accident of the light water research reactor. The thermal reactor power was adopted equal to 10 MW. The stack height is equal to 100 m. The supposed reactor site is located near Isfahan city (Iran). The radionuclide composition of the reactor for the different situations are estimated. The collective dose values for the largest cities located near this reactor are in the range from $2.17 \cdot 10^{-6}$ man*Sv/yr (Falavarjan city) to $1.45 \cdot 10^{-4}$ man*Sv/yr (Isfahan city). The average annual individual dose value for this region is equal to $1.0 \cdot 10^{-11}$ Sv/yr approximately and it is not higher than 0.0005% of the external irradiation dose connected with the natural radionuclides and with the "global" radioactive environment contamination. Annual ^{137}Cs fallout is in the range of 0.02-0.2 mBq/m², which is equal to 10^{-7} -th fraction of the accumulated soil activity after the atmospheric nuclear tests.

УДК 621.039.51

On Some Modifications of the Point Reactor Kinetics Equations \ B.D.Abramov; Editorial board of Journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy, Yadernaya energetika" (Communications of Higher