

УДК 504.064, 519.6

ОПТИМАЛЬНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПРИРОДНЫХ ПРОЦЕССОВ С ОЦЕНКОЙ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ

В. В. Пененко, Е. А. Цветова

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
630090 Новосибирск
E-mail: penenko@sscc.ru

Обсуждается проблема оптимального прогнозирования изменений окружающей среды под влиянием различных факторов. Основу предлагаемой методики составляют вариационные принципы и методы теории чувствительности с учетом неопределенностей в математических моделях и входных данных. Оптимальность понимается как независимость оценок прогнозируемых функционалов от вариаций искомым функций состояния. Помимо функций состояния к числу прогнозируемых характеристик относятся функции риска и уязвимости для областей-рецепторов и количественные оценки неопределенностей.

Ключевые слова: оптимальное прогнозирование, математическое моделирование, качество природной среды, анализ чувствительности, оценка неопределенности, уравнения конвекции, диффузии, реакции.

Введение. Качество прогнозов изменения окружающей среды, полученных с помощью методов математического моделирования, существенно зависит от того, какая степень неопределенности допускается в формулировках математических моделей и исходных данных для расчетов. Источниками неопределенностей, всегда присутствующих в моделях, являются недостаточность знаний о физических процессах, погрешности численных схем и алгоритмов их реализации, а также погрешности задания входной информации. Эта информация, в свою очередь, берется из данных наблюдений, полученных с помощью систем мониторинга, что добавляет другие неопределенности, обусловленные погрешностями измерений и неточностью их представления математическими моделями, используемыми для вычисления образов регистрируемых величин в терминах функций состояния моделей процессов.

В последние годы активно развиваются различные подходы к оценке неопределенностей и предлагаются способы ослабления их влияния на качество прогнозов. Существенную роль в этих подходах играют методы сопряженных уравнений, разработанные Г. И. Марчуком [1]. Применительно к моделям прогноза погоды наибольший прогресс достигнут в уменьшении неопределенностей за счет улучшения оценок начального состояния прогнозируемых полей и формирования прогнозов на основе результатов реализации прогностических ансамблей вместо традиционных одиночных сценарных расчетов. В последнее время предлагаются новые методы теории чувствительности и усвоения данных для анализа ошибок прогноза и организации адаптивных стратегий мониторинга. Описание основных подходов и обзор литературы по этим направлениям приведены в [2–7].

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 16, Программы Математического отделения РАН № 1.3 и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 07-05-00673).

В настоящей работе рассматривается задача, в которой также прогнозируются природные процессы. Однако это не только прогноз изменения качества окружающей среды, но и оценка рисков и уязвимости территорий и поиск оптимальных стратегий управления качеством природной среды в зависимости от изменяющихся параметров модели и внешних воздействий. Описание различных подходов, развиваемых для решения данных проблем, приведено, например, в [8]. Большинство подходов являются “прямыми”, их суть состоит в получении результатов с использованием различных наборов начальных данных путем интегрирования вперед по времени. Окончательные выводы можно сделать, сравнивая и анализируя конкретные реализации. Ясно, что для получения достоверных прогнозов необходимо рассмотреть большое количество вариантов. Поэтому такая технология прогнозирования является нерациональной даже при использовании высокопроизводительных вычислительных систем. Еще один недостаток методов прямого моделирования — значительные трудности, возникающие при определении вклада различных источников ошибок в результаты прогнозов.

Для преодоления указанных недостатков в настоящей работе предложена методика решения природоохранных задач с использованием комбинации методов прямого и обратного моделирования и методов теории чувствительности моделей [9–17]. Данный подход основан на специально построенных вариационных принципах для решения взаимосвязанных задач окружающей среды и климата на базе нелинейных моделей динамики атмосферы и водных объектов, переноса и трансформации загрязняющих примесей. Модели процессов включаются в структуру вариационных принципов в обобщенной формулировке, в которую явно вводятся функции неопределенностей (ФН). Целевой функционал прогноза дополняется функционалами, выражающими суммарную меру всех неопределенностей и (при наличии данных наблюдений) оценку отклонений измеренных величин от их образцов, рассчитанных в терминах функций состояния. На основе вариационных методов теории чувствительности с помощью функций чувствительности (ФЧ) определяется роль различных факторов в формировании изучаемых процессов, что позволяет количественно и качественно оценить влияние неопределенностей в описании этих факторов на качество прогнозов.

Постановка задачи. В математическую модель пространственно-временной эволюции изучаемых процессов входят модели динамики атмосферы, предназначенные для формирования гидродинамики несущей среды, а также модели, описывающие процессы переноса и трансформации различных субстанций и предназначенные для воспроизведения и прогнозирования качества атмосферы. Поскольку в настоящей работе детальное представление гидродинамической части модели не требуется, приведем только формулировку моделей, описывающих процессы конвекции, диффузии, реакции, являющиеся ключевыми элементами в постановках природоохранных задач:

$$\frac{\partial \pi \varphi_i}{\partial t} + \operatorname{div} \pi (\varphi_i \mathbf{u} - \mu_i \operatorname{grad} \varphi_i) + \pi (S\varphi)_i - \pi (f_i(\mathbf{x}, t) + r_i) = 0. \quad (1)$$

Здесь $\varphi = \{\varphi_i(x, t), i = \overline{1, n_s}\} \in Q(D_t)$ — часть вектор-функций состояния всего комплекса моделей, описывающих поведение различных субстанций в четырехмерной области D_t ; n_s — число различных компонент; компоненты φ_i представляют собой температуру, составляющие гидрологического цикла в атмосфере (водяной пар, облачная вода, дождевая вода, снег и ледовые кристаллы), концентрации загрязняющих примесей в газовом и аэрозольном состояниях; $\mathbf{Y} \in R(D_t)$ — вектор параметров модели; $\mathbf{f} = \{f_i(\mathbf{x}, t), i = \overline{1, n_s}\}$ — функции источников тепла, влаги и примесей; $\mathbf{r} = \{r_i(\mathbf{x}, t), i = \overline{1, n_s}\}$ — функции, описывающие неопределенности и ошибки моделей; $(S\varphi)_i$ — нелинейные матричные операторы, которые описывают локальные процессы трансформации соответствующих субстанций и не содержат производных от функций состояния по \mathbf{x} и t . В уравнения (1) явно входят

следующие характеристики гидродинамического фона: $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ — вектор скорости; $\mu_i = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)_i$ — диагональный тензор коэффициентов турбулентного обмена для субстанции φ_i в направлении координат $\mathbf{x} = \{x_i\}$, $i = \overline{1, 3}$; π — функция, определяемая через метеоэлементы в соответствии со структурой вертикальной координаты в области D_t . Функция π и вектор скорости удовлетворяют уравнению неразрывности несущей среды

$$\frac{\partial \pi}{\partial t} + \operatorname{div} \pi \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

Модели процессов, структура областей и системы координат, используемые в настоящей работе, подробно описаны в [10, 12].

Начальные условия и параметры моделей запишем в виде

$$\varphi^0 = \varphi_a^0 + \xi \quad \text{при} \quad t = 0, \quad \mathbf{Y} = \mathbf{Y}_a + \zeta, \quad (3)$$

где индексом a отмечены априорные оценки.

Краевые условия для замыкания моделей следуют из физического содержания изучаемой задачи и могут представлять собой условия Дирихле, Неймана и условия третьего рода на различных участках границы области D_t .

Обозначим через Ψ_m набор данных измерений на множестве $D_t^m \subset D_t$ и определим совокупность моделей наблюдений для формирования образов измеряемых величин в терминах функций состояния:

$$\Psi_m = [H(\varphi)]_m + \eta. \quad (4)$$

Здесь $[\cdot]_m$ — оператор переноса информации с сетки $D_t^h \subset D_t$ на множество D_t^m . Сеточная область D_t^h вводится для построения дискретных аппроксимаций модели. Функции \mathbf{r} , ξ , ζ , η в (1), (3), (4) описывают неопределенности и ошибки соответствующих объектов. При построении алгоритмов в число компонент вектора параметров удобно включать не только внутренние характеристики моделей, но и источники, начальные условия и неоднородности краевых условий.

Введем совокупность целевых и управляющих функционалов, необходимых для решения задач оценки качества моделей, мониторинга и диагностики природной среды, экологического прогнозирования и проектирования. Определим эти функционалы как функционалы общего вида [11]:

$$\Phi_k(\varphi, \mathbf{Y}) = \int_{D_t} F_k(\varphi, \mathbf{Y}) \chi_k(\mathbf{x}, t) dD dt = (F_k, \chi_k), \quad k = \overline{1, K}, \quad K \geq 1. \quad (5)$$

Здесь $F_k(\varphi, \mathbf{Y})$, $\chi_k(\mathbf{x}, t) \geq 0$ — оцениваемые и весовые функции; (F_k, χ_k) — скалярное произведение. Конкретный вид всех объектов в (5) зависит от целей исследований. Функции $F_k(\varphi, \mathbf{Y}) \in Q(D_t)$ выберем ограниченными, непрерывными по Липшицу и дифференцируемыми по Гато относительно функциональных аргументов $(\varphi, \mathbf{Y}) \in \{Q(D_t) \times R(D_t)\}$. Структуру весовых функций определим исходя из следующих соображений.

1. Примем в (5) $\chi_k(\mathbf{x}, t) \in Q^*(D_t)$ ($Q^*(D_t)$ — пространство функций, сопряженное по отношению к пространству функций состояния $Q(D_t)$). Эти функции определяют меры Радона или Дирака $\chi_k(\mathbf{x}, t) dD dt$ в D_t . Свойства таких мер детально изучены в [18]. Для определенности потребуем, чтобы выполнялись условия нормировки $\int_{D_t} \chi_k(\mathbf{x}, t) dD dt = 1$.

2. Определим область D_t^v оценивания функций $F_k(\varphi, \mathbf{Y})$ в D_t с помощью носителей значений $\chi_k > 0$. В частности, в задачах усвоения данных носитель функции χ_k на $D_t^v \subset D_t^m \subset D_t$ описывает схему размещения мест наблюдений (4), учитываемых в функционалах.

3. Зададим диапазон значений χ_k , так чтобы область D_t^v можно было ранжировать по степени вклада функции F_k , определенной в различных частях области оценивания, в суммарную величину функционала Φ_k .

Вариационный принцип с учетом неопределенностей. Для решения задач используем вариационный принцип [10, 11]. Определим расширенный функционал, объединяющий все элементы системы моделирования (1)–(5):

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_k^h(\varphi) = & [I^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi_k^*)]_{D_t^h} + [\alpha_0 \Phi_k^h(\varphi, \mathbf{Y}) + 0,5\alpha_1(\eta^T W_1 \eta)_{D_t^m}]^h + \\ & + (1/2)[\alpha_2(\mathbf{r}^T W_2 \mathbf{r})_{D^h} + \alpha_3(\boldsymbol{\xi}^T W_3 \boldsymbol{\xi})_{D^h} + \alpha_4(\boldsymbol{\zeta}^T W_4 \boldsymbol{\zeta})_{R^h(D_t^h)}]^h. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь Φ_k — целевой функционал вида (5); функционал $I(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi_k^*) = 0$ представляет собой интегральное тождество для описания модели (1) в вариационной формулировке [10]; $\alpha_i \geq 0$ ($i = \overline{0,4}$) — весовые коэффициенты; индексом h отмечены дискретные аналоги соответствующих объектов. Последние четыре функционала в (6) определим с помощью скалярных произведений энергетического типа. Структура функционалов в (6) описывается формулами вида (5). Конкретное содержание этих функционалов определяется заданием оцениваемых и весовых функций в составе соответствующих скалярных произведений. В третьем слагаемом выражения (6), содержащем функцию $\boldsymbol{\eta}$ из (4), учитываются все доступные данные наблюдений Ψ_m .

Весовые матрицы W_i в функционалах (6) определим таким образом, чтобы функционалы выражали энергетическую норму, учитывающую различия физических размерностей соответствующих многокомпонентных функций. При таком способе задания весовых функций и мер все функционалы для дискретных и распределенных характеристик получают по единому правилу, что является существенным при построении и реализации адаптивных алгоритмов, которые должны работать в режиме слежения за пространственно-временной динамикой носителей различных информационных полей.

Универсальный алгоритм прямого и обратного моделирования. Следуя [11, 13], построим схему универсального алгоритма прямого и обратного моделирования с количественной оценкой функций неопределенностей.

Запишем дискретную (по времени) аппроксимацию расширенного функционала (6) с использованием метода расщепления:

$$\tilde{\Phi}_k^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi_k^*) = \sum_{j=1}^J \left(\int_D \sum_{\alpha=1}^p \left(\frac{(M_\alpha, \boldsymbol{\psi}_\alpha^{*j})}{\Delta \tau_\alpha^j} + (N_\alpha, \boldsymbol{\varphi}_\alpha^{*j}) + (\mathbf{U}, \boldsymbol{\varphi}^{*j}) \right) dD \Delta t_j + \Phi_0^{hj} \right). \quad (7)$$

Здесь

$$M_\alpha \equiv \boldsymbol{\psi}_\alpha^j - \boldsymbol{\varphi}^{j-1} + \Delta \tau_\alpha^j (L_\alpha^j \boldsymbol{\psi}_\alpha^j - \mathbf{f}_\alpha^j - \mathbf{r}_\alpha^j) = 0; \quad (8)$$

$$N_\alpha \equiv \boldsymbol{\psi}_\alpha^j - [\sigma_\alpha \boldsymbol{\varphi}_\alpha^j + (1 - \sigma_\alpha) \boldsymbol{\varphi}^{j-1}] = 0; \quad (9)$$

$$\mathbf{U} \equiv \boldsymbol{\varphi}^j - \frac{1}{p} \sum_{\alpha=1}^p \boldsymbol{\varphi}_\alpha^j = 0, \quad j = \overline{1, J}, \quad \alpha = \overline{1, p}, \quad p \geq 1; \quad (10)$$

Φ_0^{hj} — декомпозиция по времени взвешенной суммы функционалов, входящих в состав расширенного функционала (6), кроме первого; индекс j определяет номер шага по времени; J — число шагов по времени; α — номер этапа расщепления; p — число этапов расщепления; Δt_j — шаг по времени; $\Delta \tau_\alpha^j = p \sigma_\alpha \Delta t_j$; $0,5 \leq \sigma_\alpha \leq 1,0$ — весовые коэффициенты для двухслойных аппроксимаций по времени. При $\sigma_\alpha = 0,5$ схема имеет второй порядок точности, при $\sigma_\alpha = 1$ — первый. Соотношения

$$L = \sum_{\alpha=1}^p L_\alpha, \quad \mathbf{f} = \sum_{\alpha=1}^p \mathbf{f}_\alpha, \quad \mathbf{r} = \sum_{\alpha=1}^p \mathbf{r}_\alpha$$

определяют аддитивные представления пространственного оператора $L(\varphi, \mathbf{Y})$ модели (1), функции источников и неопределенностей соответственно при построении схем расщепления.

В модели содержатся операторы двух типов: конвективно-диффузионные операторы по трем координатным направлениям и операторы трансформации субстанций. Эти операторы определены в каждой точке сетки D_t^h и на каждом шаге по времени. Всего в схеме имеется четыре оператора и, следовательно, четыре этапа расщепления. В соответствии с такими определениями первое слагаемое в (7) представляет собой аппроксимацию функционала интегрального тождества модели (1), записанного в терминах метода расщепления с использованием агрегатов типа (8) в вариационной формулировке. Второе и третье слагаемые в (7) определяют связи (9), (10) образов функций состояния ψ_α^j и φ_α^j на этапах расщепления с функцией состояния модели φ^j в моменты времени t_j ; ψ_α^{*j} , φ_α^{*j} , φ^{*j} — соответствующие им компоненты сопряженной функции состояния. Выражение для M_α представляет собой результат действия оператора двухслойной схемы по времени на этапе расщепления с номером α . Напомним, что скалярные произведения в (7) определены в соответствии с многокомпонентной структурой вектор-функций в (1). Дискретизация операторов и функционалов в (7), (8) по пространственным переменным осуществляется на основе гибридного метода дискретно-аналитических аппроксимаций [16]. Для конвективно-диффузионных операторов этот метод обеспечивает монотонность, устойчивость, транспортность численных схем и их согласованность в исходном (прямом) и сопряженном вариантах.

Использование аналитических решений исключает влияние счетной вязкости. Принципиальное значение имеет тот факт, что полученный класс схем не содержит искусственных процедур монотонизации и корректировки потоков, увеличивающих степень неопределенности численных моделей. Дело в том, что искусственные процедуры монотонизации генерируют нелинейные эффекты самолимитируемой диффузии, не свойственные реальным процессам переноса. Это может оказать существенное влияние на результаты прогнозирования эволюции многокомпонентных субстанций, поскольку для каждого компонента будет иметь место своя саморегулирующаяся диффузионная ситуация. Так как все субстанции одновременно участвуют в реакциях, описываемых в (1) операторами трансформации, неясно, какой будет получен прогноз.

Не описывая подробно вычислительную технологию, представим ее основные элементы, реализующие условия стационарности расширенного функционала (6) по отношению к вариациям его функциональных аргументов $\partial\tilde{\Phi}^h/\partial s = 0$ ($s = \varphi, \varphi^*, \mathbf{r}, \xi, \zeta$). В результате преобразований получаем систему основных уравнений

$$\frac{\partial\tilde{\Phi}^h}{\partial\varphi^*} = 0 \quad \forall\varphi^* = (\psi_\alpha^{*j}, \varphi_\alpha^{*j}, \varphi^{*j}) \in Q^{*h}(D_t^h), \quad (11)$$

систему сопряженных уравнений

$$\frac{\partial\tilde{\Phi}^h}{\partial\varphi} = 0 \quad \forall\varphi = (\psi_\alpha^j, \varphi_\alpha^j, \varphi^j) \in Q^h(D_t^h); \quad (12)$$

$$\varphi^{*J+1}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in D^h, \quad (13)$$

систему уравнений для оценок неопределенностей

$$\frac{\partial\tilde{\Phi}^h}{\partial\mathbf{r}} = \alpha_2 W_2 \mathbf{r} - \varphi^*(\mathbf{x}, t) = 0; \quad (14)$$

$$\frac{\partial\tilde{\Phi}^h}{\partial\xi} = \alpha_3 W_3 \xi - \varphi^*(\mathbf{x}, 0) = 0; \quad (15)$$

$$\frac{\partial \tilde{\Phi}^h}{\partial \zeta} = \alpha_4 W_4 \zeta + \left(\alpha_0 \frac{\partial \Phi_k^h}{\partial \mathbf{Y}} + \frac{\partial I^h}{\partial \mathbf{Y}} \right) \Big|_{\mathbf{Y}=\mathbf{Y}_a} = 0. \quad (16)$$

Верхним индексом “*” отмечены сопряженные (транспонированные) операторы и функции из сопряженного пространства. Система (11) представляет собой совокупность аддитивно-усредненных схем покомпонентного расщепления, свойства которых детально описаны в [19]. Эти схемы позволяют на каждом интервале времени независимо реализовать все этапы расщепления и обеспечить параллельную структуру вычислений в целом. В уравнении (16) учитываются только составляющие ФЧ, соответствующие параметрам, для которых неопределенности в составе функционалов $\tilde{\Phi}_k^h$ и I^h учтены явно.

Решив задачи (11)–(16), соотношения чувствительности для целевых функционалов можно рассчитать с помощью алгоритма

$$\delta \Phi_k^h(\varphi, \mathbf{Y}) = \frac{\partial}{\partial a} \left[\Phi_k^h(\varphi, \mathbf{Y} + a \delta \mathbf{Y}) + I^h(\varphi, \mathbf{Y} + a \delta \mathbf{Y}, \varphi_k^*) \right] \Big|_{a=0} \equiv \left(\frac{\partial \Phi_k^h}{\partial \mathbf{Y}}, \delta \mathbf{Y} \right), \quad (17)$$

где $\delta \mathbf{Y}$ — вариации параметров; a — вещественный параметр; φ — решение основной задачи; φ_k^* — решение задачи (11), порождаемой функционалом Φ_k ($k = \overline{1, K}$). В отличие от (16) в соотношениях чувствительности (17) учтены все слагаемые с вариациями всех характеристик, которые являются параметрами модели.

Обратные задачи для идентификации параметров. На практике для решения обратных и оптимизационных задач проектирования и прогнозирования целевые функционалы (5) следует выбирать с учетом априорных сведений о функциях состояния и параметрах моделей, например, включив в состав функционала (4) параметрическую часть:

$$\Phi_k(\varphi, \mathbf{Y}) = (F_k, \chi_k) + \frac{1}{2} \int_{D_t} \left(\sum_{i=1}^N [\gamma_1 \Gamma_{ip}^{(1)} |\text{grad}(Y_i - \tilde{Y}_i)|^2 + \gamma_2 \Gamma_{ip}^{(2)} (Y_i - \tilde{Y}_i)^2] \right) dD dt. \quad (18)$$

Здесь \tilde{Y}_i — априорные значения параметров, вычисляемые по схемам физической параметризации моделей (например, коэффициенты турбулентности, характеристики процессов взаимодействия субстанций с неоднородностями поверхности Земли и др.); $\gamma_1 \geq 0$, $\gamma_2 \geq 0$ — весовые множители; $\Gamma_{ip}^{(\alpha)}$ — положительные диагональные матрицы масштабирующих коэффициентов и весов, построенные по образцу матриц W_i в (6); N — общее число параметров.

Следуя [10], построим систему уравнений обратной связи для идентификации параметров на основе условий минимизации целевого функционала и соотношений чувствительности (17):

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = -\varkappa \Gamma_i^{-1} \left(\frac{\partial I^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi^*)}{\partial Y_i} - \gamma_1 \text{div} \Gamma_{ip}^{(1)} \text{grad}(Y_i - \tilde{Y}_i) + \gamma_2 \Gamma_{ip}^{(2)} (Y_i - \tilde{Y}_i) \right). \quad (19)$$

Здесь \varkappa — итерационный параметр; Γ_i — диагональная матрица весов для формирования метрики в пространстве параметров.

Все численные схемы для задач (11)–(19) построены на основе вариационного принципа для оценок функционала (6). Способ построения этих схем обеспечивает взаимную согласованность всех элементов алгоритма. В общем случае комплекс задач (11)–(19) решается итерационными методами. Функционалы, входящие в (6), аппроксимируются с использованием методов декомпозиции и расщепления. Уравнения (19) решаются также с помощью схем расщепления, согласованных с общей структурой алгоритма. Следует заметить, что если данные наблюдений усваивать через функционал (6) и при этом “окна” усвоения данных принимать равными интервалам дискретизации моделей по времени, то можно построить прямые (не итерационные) алгоритмы решения задач (11)–(19) в режиме реального времени. Некоторые модификации таких алгоритмов описаны в [13].

Функции чувствительности и неопределенности в системе моделирования.

Для оценок неопределенностей выполним один цикл вычислений по схеме (11)–(16) с априорно заданными значениями входных данных $\{\varphi_a, \varphi_a^0(\mathbf{x}), \mathbf{Y}_a, \mathbf{f}_a, \mathbf{r}_a = 0, \zeta_a = 0, \xi_a = 0\}$. В качестве выходной информации получаем совокупность значений функций $\{\varphi(\mathbf{x}, t), \varphi^*(\mathbf{x}, t), \mathbf{r}(\mathbf{x}, t), \xi(\mathbf{x}, t), \zeta(\mathbf{x}, t)\}$ и полный набор ФЧ $\{\partial\Phi_k^h/\partial\mathbf{Y}\}_i, i = \overline{1, N}$, входящих в соотношение чувствительности (17). Все эти функции определяются из условий оптимальности оценки прогностического функционала (5), (18). Оптимальность понимается в том смысле, что величина вариации оцениваемого функционала не зависит от вариаций $\delta\varphi(\mathbf{x}, t)$ и $\delta\varphi^*(\mathbf{x}, t)$ в окрестности текущей фазовой траектории процесса в области D_t . Численная схема для нахождения функции $\varphi(\mathbf{x}, t)$ строится таким образом, чтобы значения вариаций $\delta\tilde{\Phi}_k^h$ и $\delta I^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi^*)$ функционалов (6), (7) не зависели от вариаций $\delta\varphi^*$ функций $\varphi^*(\mathbf{x}, t)$ и вариаций ФН. Из уравнений (11), (14) следует, что ФН \mathbf{r} модели с точностью до весовых матриц и коэффициентов определяются через решения сопряженных задач, порождаемых вариационным принципом для расширенного функционала. Поэтому в общем случае для оценок неопределенностей по схеме (11)–(16) достаточно определить структуру прогнозируемого функционала $\tilde{\Phi}_k$. Решение сопряженной задачи $\varphi_k^*(\mathbf{x}, t)$ используется в алгоритмах (17)–(19) для расчета ФЧ $\tilde{\Phi}_k$ к вариациям $\delta\mathbf{Y}$ параметров \mathbf{Y} . Напомним, что при построении алгоритмов в число параметров включаются источники $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$, начальные условия и неоднородности краевых условий.

Применение ФН и ФЧ может иметь особенности. В частности, применение ФЧ направлено, главным образом, на исследование тенденций в поведении функционалов в пространстве параметров, что необходимо для идентификации параметров, источников, начальных и краевых условий и т. д. Действительно, из соотношений (17) следует, что ФЧ представляют собой частные производные прогнозируемых функционалов относительно параметров моделей и источников. В зависимости от целей исследования и характера функционалов ФЧ можно интерпретировать как функции влияния, ценности, риска, уязвимости, наблюдаемости.

ФН позволяют получить количественную оценку ошибок соответствующих элементов модели при условиях оптимальности прогнозируемых характеристик. Конкретные значения ФН зависят от выбора весовых матриц \mathbf{W}_i и коэффициентов α_i в (6). Следует отметить, что выбор этих элементов, формирующих метрику в пространстве неопределенностей, требует проведения специальных исследований и может являться весьма сложной задачей. Предложенный алгоритм обеспечивает получение прогностических оценок при условии минимизации функционалов неопределенностей в (6). Это обусловлено тем обстоятельством, что в силу равенств (14)–(16) общий характер ФН и ФЧ определяется функциями $\varphi_k^*(\mathbf{x}, t)$. Последние получаются из решения задачи (12) при заданной структуре целевого функционала и функционала усвоения данных. Поэтому для анализа системы в целом и разработки адаптивных стратегий мониторинга все выходные характеристики системы моделирования (11)–(19) должны использоваться в комплексе. Например, если задача заключается в построении адаптивной схемы размещения мобильных средств мониторинга для уменьшения неопределенностей прогноза, то наиболее подходящими являются области с повышенными значениями функций $\varphi_k^*(\mathbf{x}, t)$, ФН и ФЧ. Это обусловлено тем, что данные функции получаются из условий оптимальности оценок обобщенных характеристик прогноза. Такие области выделяются по заданным уровням значимости соответствующих функций относительно их максимальных значений в D_t^h . Функции $\varphi_k^*(\mathbf{x}, t)$, ФН и ФЧ играют основную роль в построении прямых и обратных связей между параметрами системы и целевыми функционалами. Это следует из системы уравнений (11)–(19) для задач прогноза и усвоения данных наблюдений.

В различных модификациях вариационных методов усвоения данных реализуется схема, впервые предложенная в [9]. В этой схеме целевой функционал качества минимизируется относительно функции, описывающей начальное состояние $\varphi^0(\mathbf{x})$. При этом обратная связь реализуется только через решение сопряженной задачи при $t = 0$: $\varphi^*(\mathbf{x}, 0)$.

Явное включение в структуру моделей и параметров функций неопределенностей коренным образом меняет ситуацию. Действительно, в функциях $\varphi^*(\mathbf{x}, t)$ сопряженные задачи (12) аккумулируют информацию, распределенную в D_t , о характере всех данных мониторинга, входящих в состав функционала наблюдений через функцию $\boldsymbol{\eta}$ из (4) и используемых при вычислении функций источников в системе уравнений (12). Далее, из уравнения (14) следует, что через ФН \mathbf{r} в режим обратной связи для системы (11) непосредственно включается все четырехмерное фазовое пространство значений функции $\varphi^*(\mathbf{x}, t)$, а через ФН параметров $\boldsymbol{\zeta}$ — все ФЧ целевого функционала к вариациям параметров. В традиционной же схеме усвоения работает только уравнение (15), связывающее функцию $\boldsymbol{\xi}$ с $\varphi^*(\mathbf{x}, t)$ в начальный момент времени $t = 0$ и обеспечивающее корректировку функции начального состояния в (3).

При введении ФН система моделирования в целом приобретает новое качество. Речь идет о регуляризации вычислительных алгоритмов. В качестве примера рассмотрим случай, когда операторы моделей процессов и моделей наблюдений линейны относительно функций состояния: $L(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{Y}) = A(\mathbf{Y})\boldsymbol{\varphi}$, $H(\boldsymbol{\varphi}) = H\boldsymbol{\varphi}$. Такая ситуация имеет место, когда оператор трансформации многокомпонентных примесей в модели (1) является линейным (или линеаризованным). При этих предположениях и при $\pi = \text{const}$ система уравнений (11)–(14) принимает вид

$$\begin{aligned} \Lambda\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{f} - \mathbf{r} &= 0, & \Lambda\boldsymbol{\varphi} &\equiv \left(\frac{\partial\boldsymbol{\varphi}}{\partial t} + A(\mathbf{Y})\boldsymbol{\varphi} \right)^h, \\ \Lambda^*\boldsymbol{\varphi}^* + \alpha_0 W_0(\boldsymbol{\varphi} - \boldsymbol{\varphi}_a) + \alpha_1 H^T W_1(\boldsymbol{\Psi} - H\boldsymbol{\varphi}) &= 0, \\ \mathbf{r} &= \alpha_2^{-1} W_2^{-1} \boldsymbol{\varphi}^*. \end{aligned} \quad (20)$$

Исключая из этих уравнений функции $\boldsymbol{\varphi}^*$ и \mathbf{r} , после преобразований получаем систему уравнений

$$\Lambda^* W_2 \Lambda \boldsymbol{\varphi} + \alpha_2^{-1} (\alpha_0 W_0 + \alpha_1 H^T W_2 H) \boldsymbol{\varphi} = \Lambda^* W_2 \mathbf{f} + \alpha_2^{-1} (\alpha_0 W_0 \boldsymbol{\varphi}_a + \alpha_1 H^T W_2 \boldsymbol{\Psi}). \quad (21)$$

Так как $\alpha_i \geq 0$, Λ — неособенный оператор монотонного типа, W_i — диагональные весовые матрицы с положительными элементами, то системы (20), (21) являются хорошо обусловленными. Из (21) следует, что при $\alpha_0 > 0$, $\alpha_1 > 0$ включение в алгоритм количественного аппарата оценок неопределенностей вносит эффект регуляризации, аналогичный регуляризации по Тихонову, и тем самым улучшает свойства сходимости итерационных алгоритмов при решении обратных и оптимизационных задач. Заметим, что согласно схеме алгоритма решается система (20), а система (21) выписана только для анализа алгоритма в целом.

Обратная задача оценки прогностических функционалов. В настоящей работе развивается методика прогнозирования, описанная в [10, 11, 15, 18], поэтому, следуя традиции отработки теоретических положений методики на решении конкретных задач, как и в [14], в качестве примера приведем сценарий долгосрочного прогноза экологической ситуации в Восточно-Сибирском регионе. В этом регионе имеется развитый территориально-промышленный комплекс с высокой антропогенной нагрузкой на природную среду. Кроме того, он расположен в Центрально-Азиатской энергоактивной зоне глобальной климатической системы, особенностями которой являются Саяно-Алтайский циклогенез [20] и повышенная сейсмическая активность. В регионе также находится особо охраняемая территория — озеро Байкал, являющееся объектом мирового наследия. Все это обуславливает

актуальность проблемы долгосрочного экологического прогнозирования и оценки экологических рисков для этой территории.

Задача состоит в долгосрочной оценке (в интервале времени с 1 до 31 октября 2005 г.) прогностического функционала, который выбран по типу (5), с весовой функцией, имеющей ненулевую носитель в четырехмерной области рецептора, представляющего собой трехмерную область атмосферы над акваторией озера, простирающуюся по вертикали от поверхности воды до уровня, соответствующего давлению 10 гПа. Величина этого функционала представляет собой суммарное количество загрязняющих примесей, находившихся в выделенной области в указанный интервал времени. Решить поставленную задачу традиционными методами прямого моделирования достаточно сложно. Действительно, поле примесей в атмосфере формируется от источников различной природы, расположенных практически на всем земном шаре, а количественная информация об их эмиссии недоступна. Воздушные массы, несущие примеси, проходят через регион и область рецептора от одной границы до другой за интервал времени порядка одних суток. Для решения задачи требуется оценка количества примеси, которая проходит через область над озером в течение месяца. Часть этой примеси осаждается на подстилающей поверхности.

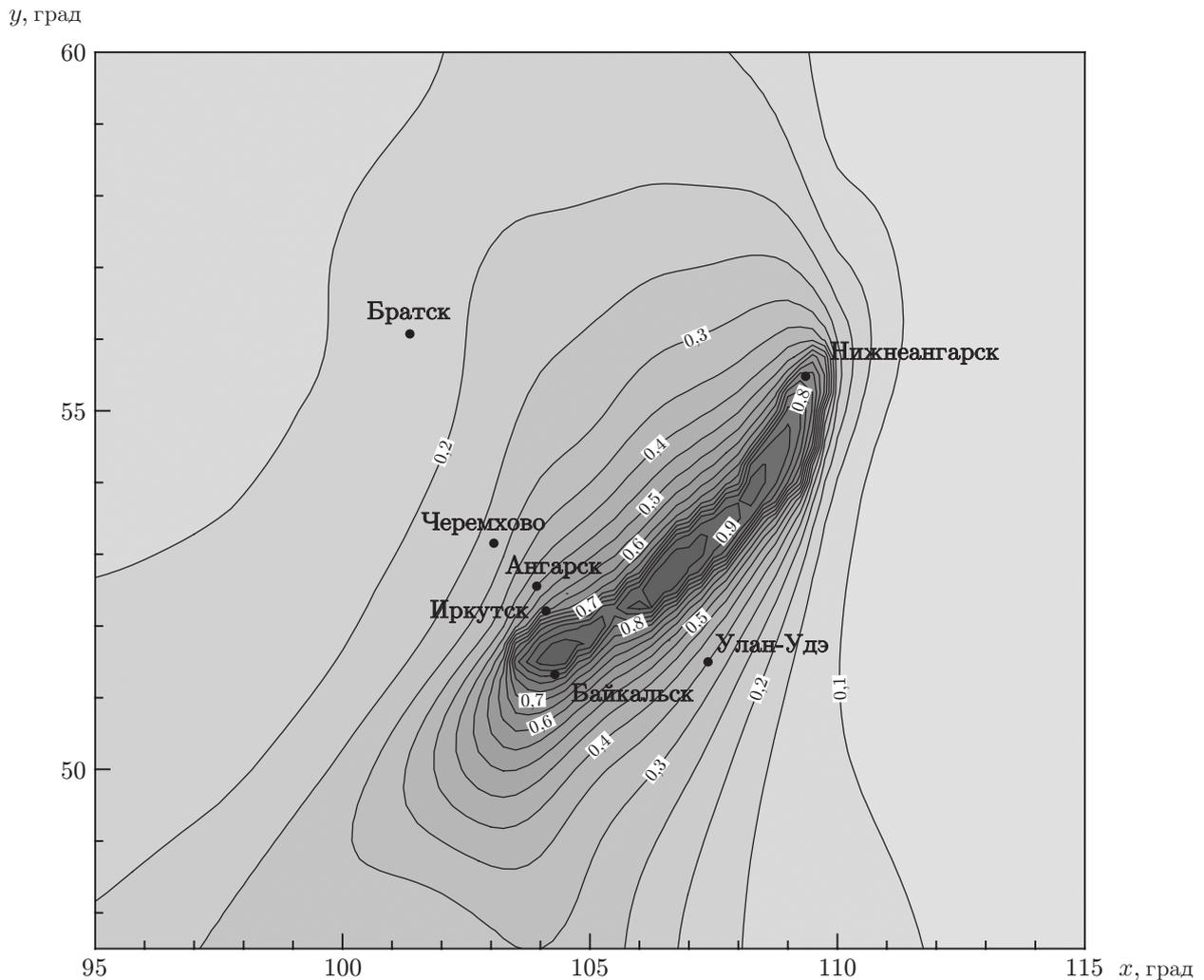
Описанные выше методы обратного моделирования и способы организации прогностических сценариев [17] позволяют получить необходимые оценки, приемлемые для практического использования, без задания информации об эмиссии. Для расчетов используется комплекс математических моделей, общая структура которого описана в [12], с модификациями, представленными в настоящей работе.

Гидродинамическая часть сценария, формируемая с использованием данных реанализа [21], организована так же, как и в [14, 15]: динамика четырехмерных полей метеоэлементов рассчитывается с дискретностью по времени 30 мин в области D (по горизонтальным переменным $47,5^\circ$ с. ш. $\leq y \leq 60^\circ$ с. ш., 95° в. д. $\leq x \leq 115^\circ$ в. д. в сферических координатах) на широтно-долготной сетке с шагом $15'$ в каждом координатном направлении. Разрешение сеточной области по вертикали — 19 уровней в гибридных $(p-\sigma)$ -координатах [12] от поверхности земли до уровня, соответствующего давлению 10 гПа. Вертикальная координата следит за рельефом подстилающей поверхности.

На рисунке представлен один из основных элементов прогноза — рассчитанное поле суммарной (за месяц) оценки относительного вклада эмиссии примесей из действующих и потенциально возможных источников, расположенных на поверхности земли и находящихся в регионе, в функционал качества атмосферы в рецепторе. В расчетах предполагается, что источники и их вариации стационарны во времени. Фрагмент прогноза на рисунке соответствует нижнему расчетному уровню модели, совпадающему с верхней границей приземного слоя в используемой системе координат. Он представляет собой двумерное сечение трехмерной функции, полученной интегрированием по времени четырехмерной ФЧ прогнозируемого функционала к вариациям функции источников модели (1). Значения, приведенные на изолиниях, получены нормированием проинтегрированной ФЧ на ее максимум во всей трехмерной области атмосферы региона. Чем больше значения ФЧ, тем больше риск загрязнения рецептора от источников, находящихся в областях-носителях этих значений.

Для оценки рисков загрязнения области-рецептора вследствие трансграничных переносов необходимо учитывать информацию, содержащуюся в ФЧ на границах области D .

Анализ данных, приведенных на рисунке, и результатов расчетов, соответствующих другим временным интервалам, подтверждает сделанный ранее вывод о том, что практически все города и промышленные районы Восточно-Сибирского региона находятся в зоне высокого экологического риска для озера Байкал [14]. Особо следует отметить г. Байкальск, практически весь выброс которого попадает в атмосферу над озером.



Суммарные (за месяц) оценки относительного вклада эмиссии примесей из действующих и потенциально возможных источников

Обобщенная информация о степени экологических рисков на длительных интервалах, полученная методами обратного моделирования, более удобна и поэтому может быть использована для принятия управленческих решений, особенно при проектировании новых объектов и планировании природоохранных мероприятий.

Заключение. Предложена вариационная методика построения оптимальных долгосрочных прогнозов изменения природной среды. Преимуществом этой методики является независимость результата оценок целевого функционала, представляющего собой обобщенную характеристику качества атмосферы, от вариаций функций состояния при условии минимизации суммарной меры функций неопределенностей, в явном виде включенных в формулировки математических моделей. Предложены алгоритмы, которые наряду с расчетами функций состояния и оценками прогностических функционалов усваивают всю доступную фактическую информацию и позволяют рассчитывать функции экологических рисков и уязвимости территорий от действующих и потенциально возможных источников, а также получать количественные оценки неопределенностей в моделях и входных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Марчук Г. И.** Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992.
2. **Buizza R., Montani A.** Targeting observations using singular vectors // J. Atmospheric Sci. 1999. V. 56, N 17. P. 2965–2985.
3. **Daescu D. N., Carmichael G. R.** An adjoint sensitivity method for the adaptive location of the observations in air quality modelling // J. Atmospheric Sci. 2003. V. 60, N 2. P. 434–450.
4. **Ehrendorfer M., Tribbia J. J.** Optimal prediction of forecast error covariances through singular vectors // J. Atmospheric Sci. 1997. V. 54, N 2. P. 286–313.
5. **Gelaro R., Buizza R., Palmer T. N., Klinker E.** Sensitivity analysis of forecast errors and the construction of optimal perturbations using singular vectors // J. Atmospheric Sci. 1998. V. 55, N 6. P. 1012–1037.
6. **Kim H. M., Morgan M. C., Morss E.** Evolution of analysis error and adjoint-based sensitivities: implications for adaptive observations // J. Atmospheric Sci. 2004. V. 61, N 7. P. 795–812.
7. **Toth Z., Kalnay E.** Ensemble forecasting at NMC: the generation of perturbations // Bull. Amer. Meteor. Soc. 1993. V. 74, N 12. P. 2317–2330.
8. **Air, water and soil quality modelling for risk and impact assessment** / Ed. by A. Ebel, T. Davitashvily. Dordrecht: Springer, 2007.
9. **Пененко В. В., Образцов Н. Н.** Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. 1976. № 11. С. 1–11.
10. **Пененко В. В.** Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981.
11. **Penenko V.** Some aspects of mathematical modelling using the models together with observational data // Bull. Novosib. Comp. Center. Ser. Numer. Model in Atmosphere, Ocean Environment. Studies. 1996. V. 4. P. 31–52.
12. **Пененко В. В., Цветова Е. А.** Структура комплекса моделей для исследования взаимодействий в системе “озеро Байкал — атмосфера региона” // Оптика атмосферы и океана. 1998. Т. 11, № 6. С. 586–593.
13. **Пененко В. В.** Вариационное усвоение данных в реальном времени // Вычисл. технологии. 2005. Т. 10, № 8. С. 9–20.
14. **Пененко В. В., Цветова Е. А.** Математические модели для изучения рисков загрязнения природной среды // ПМТФ. 2004. Т. 45, № 2. С. 136–146.
15. **Пененко В. В., Цветова Е. А.** Математические модели природоохранного прогнозирования // ПМТФ. 2007. Т. 48, № 3. С. 152–163.
16. **Penenko V., Tsvetova E.** Orthogonal decomposition methods for inclusion of climatic data into environmental studies // Ecol. Model. 2008. V. 217. P. 279–291.
17. **Penenko V., Tsvetova E.** Discrete-analytical methods for the implementation of variational principles in environmental applications // J. Comput. Appl. Math. 2008. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2008.08.018>.
18. **Шварц Л.** Анализ. М.: Мир, 1972.
19. **Самарский А. А.** Аддитивные схемы для задач математической физики / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. М.: Наука, 2001.
20. **Chen S.-J., Kuo Y.-H., Zhang P.-Z., Bai Q.-F.** Synoptic climatology of cyclogenesis over East Asia, 1958–1987 // Mon. Weather Rev. 1991. V. 119, N 6. P. 1407–1418.
21. **Kalnay E., Kanamitsu M., Kistler R., et al.** The NCEP/NCAR 40-year reanalysis project // Bull. Amer. Meteorol. Soc. 1996. V. 77. P. 437–471.