

УДК 519.6:551.588.74

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МОДЕЛИ КАЧЕСТВА АТМОСФЕРЫ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ГЕОФИЗИЧЕСКОЙ ГИДРОТЕРМОДИНАМИКИ

В. В. Пененко^{*,**}, А. В. Пененко^{*,**}, Е. А. Цветова^{*}, А. В. Гочаков^{***}

* Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия

** Новосибирский национальный исследовательский государственный университет,
630090 Новосибирск, Россия

*** Сибирский региональный научно-исследовательский гидрометеорологический институт,
630099 Новосибирск, Россия

E-mails: penenko@sccc.ru, a.penenko@yandex.ru, e.tsvetova@ommgp.sccc.ru,
gochakov@sibnigmi.ru

С использованием вариационного подхода и методов теории чувствительности построены алгоритмы решения задач природоохранного прогнозирования и проектирования. При изучении поведения модели в пространстве параметров вычислены функции чувствительности как частные производные от целевых функционалов по параметрам модели, используемые для исследования свойств математических моделей и решения обратных задач. С помощью предлагаемого подхода, в котором используются модель качества атмосферы в Новосибирской агломерации и алгоритм на основе ансамбля функций чувствительности, решена обратная задача оценки положения и интенсивности источников загрязнений.

Ключевые слова: математическое моделирование, вариационные методы, ансамбль функций чувствительности, обратные задачи, модель качества атмосферы, Новосибирская агломерация, оценка источников, данные мониторинга.

DOI: 10.15372/PMTF20190220

Введение. Решение практических задач математического моделирования не исчерпывается разработкой универсальных моделей и эффективных численных методов и алгоритмов для их реализации на вычислительных машинах. Учитывая наличие неопределенностей при задании входной информации и неопределенностей, обусловленных неполнотой знаний о природе моделируемых процессов, необходимо иметь представление о качестве модели, т. е. о степени ее соответствия реальной физической системе, устойчивости и чувствительности к вариациям входных параметров. Эти вариации могут быть детер-

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00137-а) (разработка вариационного подхода для исследования чувствительности модели), Российского научного фонда (код проекта 17-71-10184) (разработка алгоритмов на основе оператора чувствительности для данных типа временных рядов), Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Новосибирской области (код проекта 17-41-543309) (построение сценария и адаптация к условиям г. Новосибирска).

© Пененко В. В., Пененко А. В., Цветова Е. А., Гочаков А. В., 2019

минированными и (или) случайными. Например, в задачах прогнозирования погоды при задании многомерных полей начальных данных используются данные наблюдений, содержащие как случайные, так и систематические ошибки. Для адекватного прогноза качества атмосферы и состояния окружающей среды при изучении климатических изменений необходимо учитывать влияние деятельности человека. Нередко такие данные отсутствуют или содержат различного рода ошибки. Кроме того, для каждой дискретной модели, описывающей изучаемые процессы, характерны ошибки аппроксимации. Следовательно, при математическом моделировании необходимо иметь средства, позволяющие описать подобные возмущения и оценить их воздействие на результат моделирования.

В модели влияние возмущений можно учитывать через возмущения параметров, под которыми понимаются не только коэффициенты моделей процессов, но и начальные данные и граничные условия задачи. Как правило, в адекватно построенных моделях эти возмущения малы по сравнению с невозмущенными значениями, и оценка их влияния может искажаться вычислительными шумами, порождаемыми самой численной моделью. Поэтому целесообразно использовать специальные формулы теории возмущений, позволяющие непосредственно связать вариации исследуемых характеристик с вариациями параметров. Принципы построения таких формул для оценок вариаций линейных функционалов с использованием сопряженных уравнений гидротермодинамики атмосферы и океана изложены в [1]. В [2] приведены аналогичные формулы для нелинейных функционалов.

Задачи, связанные с проблемой чувствительности, весьма разнообразны: оценка вариаций решения или функционалов, зависящих от него и от вариаций входных параметров; предсказание поведения модели в окрестности известного состояния; уточнение и оптимизация параметров по экспериментальной информации; оценка вариаций параметров по вариациям решения и др.

В тех случаях, когда по информации о функциях, описывающих состояние моделируемой системы, необходимо оценить параметры модели, требуется решать обратные задачи. При этом численную модель можно использовать для описания дополнительных связей между параметрами, а искомые оценки параметров получать с помощью методов оптимизации или других алгоритмов решения обратных задач.

В данной работе приводится пример использования модели качества атмосферы над областью, занятой Новосибирской агломерацией, для оценки положения и интенсивности источников загрязнений по данным измерений на станциях мониторинга путем решения обратной задачи с помощью операторов чувствительности модели.

1. Основные понятия и определения. Определим функции чувствительности модели как функции влияния изменения параметров на решение задачи. Аналогично под функциями чувствительности по отношению к заданному функционалу будем понимать функции влияния вариаций параметров на вариации функционала. Таким образом, исследование чувствительности сводится к изучению поведения модели в пространстве параметров. Для определения функций чувствительности необходимо вычислить частные производные искомого решения или функционалы, определенные на множестве решений, по параметрам модели в окрестности невозмущенных значений.

Наиболее распространенным методом изучения чувствительности моделей является метод прямого моделирования, суть которого состоит в многократном решении задачи сначала с невозмущенными параметрами, а затем с параметрами, заданными в некотором диапазоне значений. С использованием разности невозмущенного и возмущенного решений можно получить искомые оценки вариаций. Этот метод является наиболее простым и универсальным, однако, в случае если вектор параметров модели имеет большую размерность и сама математическая модель достаточно сложна, даже при наличии суперЭВМ он требует большого объема вычислительных ресурсов. Кроме того, вследствие проблемы

вычитания близких чисел метод прямого моделирования применим только при оценке влияния сравнительно больших вариаций. При малых вариациях целесообразно использовать уравнения в вариациях.

Методы исследования чувствительности в рамках вариационного подхода для задач физики атмосферы, океана и охраны окружающей среды изучались в работах [2–4]. Часто требуется оценивать вариации функционалов, определенных на решениях прямых задач моделирования, т. е. на решениях начально-краевых задач. В этих случаях целевой функционал можно принять в качестве меры чувствительности модели к вариациям параметров. Примерами таких функционалов являются полная энергия системы, среднее значение какого-либо компонента функции состояния по области решения задачи или по ее части. Даже значение решения в одной точке области можно записать в виде целевого функционала при специальном выборе весовой функции.

Приведем описание процедуры построения формул теории чувствительности в общем случае в рамках вариационного принципа. Поскольку в зависимости от целей исследования функционал может быть выбран различными способами, в работе [2] представлены общие схемы алгоритмов расчета чувствительности с использованием формализма Гато [5]. Для получения соотношений чувствительности можно использовать также более трудоемкий формализм Фреше [5], позволяющий осуществлять отладку численных алгоритмов с точки зрения согласованности прямых методов оценки чувствительности и методов оценки в рамках вариационного подхода.

В данной работе используются математические модели и аппарат численного моделирования, описанные в [4]. Определим расширенный функционал $\tilde{\Phi}(\mathbf{X})$ при формулировке вариационного принципа со слабыми ограничениями в следующем виде:

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{X}) = [I(\mathbf{X})]_{D_t} + \{\alpha_0 \Phi_0(\varphi)\}_{D_t} + 0,5\{\alpha_1(W_1\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta})_{D_t^m} + \alpha_2(W_2\mathbf{r}, \mathbf{r})_{D_t}\}; \quad (1)$$

$$I(\mathbf{X}) = \int_{D_t} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + G(\varphi, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \mathbf{r}, \varphi^* \right) dD dt = 0. \quad (2)$$

Первое слагаемое в правой части (1) — функционал интегрального тождества (2), который в обобщенном виде описывает формулировку математической модели процессов; $\varphi \in Q(D_t) \subset H$ — функция состояния, определенная в области $D_t \in \mathbb{R}^4$; $G(\varphi, \mathbf{Y})$ — оператор модели процессов; \mathbf{Y} — вектор параметров; \mathbf{f} — функции источников; $\varphi^* \in Q^*(D_t) \subset H$ — вектор-функция, имеющая такую же структуру, как и φ , и являющаяся множителем Лагранжа. Слабые ограничения в формулировке (1) означают, что структура моделей процессов не жесткая, а допускает учет дополнительных членов, включающих подлежащие оценке неизвестные функции \mathbf{r} , учитывающие все возможные ошибки и неопределенности, имеющиеся в моделях процессов, и функции $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\psi}_m - \mathbf{H}_m(\varphi)$, учитывающие ошибки данных наблюдений $\boldsymbol{\psi}_m$ и неопределенности в представлении образов наблюдаемых величин моделью измерений $\mathbf{H}_m(\varphi)$ через функции состояния φ . Функционал (2) строится по правилам составления интегрального тождества энергетического класса [6]. Скалярное произведение в нем выбирается таким образом, чтобы при $\varphi = \varphi^*$ из уравнения (2) получалось уравнение баланса полной энергии системы уравнений модели процессов. В функционале (1) $\mathbf{X} = \{\varphi, \varphi^*, \mathbf{r}, \mathbf{Y}, \mathbf{f}\}$ — вектор функциональных аргументов в системе моделирования, $\Phi_0(\varphi)$ — целевой функционал прогнозирования, $\alpha_i \geq 0$ ($i = 0, 1, 2$) — весовые коэффициенты. Два функционала во вторых фигурных скобках (1) также определены с помощью скалярных произведений энергетического типа для минимизации соответствующих объектов, учитывающих неопределенности. Весовые матрицы W_i ($i = 1, 2, 3, 4$) в функционалах (1) выберем таким образом, чтобы они имели диагональную структуру, а функционалы представляли собой энергетическую норму, учитывающую различие раз-

мерностей физических величин, являющихся компонентами соответствующих многокомпонентных функций.

При проведении численного моделирования строятся дискретные аналоги всех членов расширенного функционала (1) [2–4]. При этом применяются методы декомпозиции и расщепления в сочетании с методами конечных элементов (объемов) и методов сопряженных интегрирующих множителей. Полученный таким образом численный аналог функционала (1) обозначим $\tilde{\Phi}^h(\mathbf{X})$. Алгоритмические конструкции для построения численных схем расчета функций и операторов чувствительности формируются на основе определения вариаций и производных в смысле Гато [5]:

$$\delta^p \tilde{\Phi}^h(\mathbf{X}) = \left\{ \frac{\partial^p}{\partial \lambda^p} \tilde{\Phi}^h(\mathbf{X} + \lambda \delta \mathbf{X}) \right\} \Big|_{\lambda=0} \quad (3)$$

($p \geq 1$ — порядок вариаций; λ — вещественный параметр; $\delta \mathbf{X}$ — вариации вектора \mathbf{X}). С использованием вариаций первого порядка получаются системы дискретных уравнений для нахождения основных функций φ , φ^* , \mathbf{r} , согласованных между собой в смысле вариационного функционала (1). С помощью этих функций рассчитываются пространства функций чувствительности моделей $\partial \tilde{\Phi}^h / \partial \mathbf{Y}$, $\partial \tilde{\Phi}^h / \partial \mathbf{f}$ к вариациям параметров моделей \mathbf{Y} , \mathbf{f} и целевого функционала $\partial \tilde{\Phi}^h / \partial \psi_m$ к вариациям результатов наблюдений ψ_m . Указанные производные называются функциями чувствительности к соответствующим аргументам.

При необходимости на основе вариаций (3) второго порядка определяются операторы производных второго порядка (гессианы) и строятся алгоритмы для расчета вариаций $\delta \varphi$, $\delta \varphi^*$ и вариации функций $\delta \mathbf{r}$ в окрестности их основных траекторий (многомерный вариант так называемого метода соседних экстремалей в теории оптимального управления [7]).

Преимуществом использования вариационного подхода является возможность единого получения из (1)–(3) всех компонентов системы моделирования, включая функции чувствительности, для всех параметров модели и результатов системы наблюдений. Ниже рассматривается одна из задач природоохранного направления, в которой используются основные элементы развиваемого в данной работе метода на основе теории чувствительности.

2. Решение обратных задач и их исследование с использованием оператора чувствительности. Рассмотрим обратную задачу поиска источников примесей по данным измерений в виде временных рядов значений концентраций химических веществ в заданных точках области. Пусть имеется прямоугольная пространственная область Ω и определена пространственно-временная область $\Omega_T = \Omega \times [0, T]$ для $T > 0$. Модель переноса и трансформации в атмосфере набора веществ φ , состоящего из N_c компонентов, сформулируем в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_l}{\partial t} - \nabla \cdot (\mu \nabla \varphi_l - \mathbf{u} \varphi_l) + P_l(t, \varphi) \varphi_l &= \Pi_l(t, \varphi) + f_l + r_l, & (\mathbf{x}, t) \in \Omega_T, \\ \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \varphi_l) + \beta \varphi_l &= g_l, & (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{out} \subset \partial \Omega \times [0, T], \\ \varphi_l &= \varphi_l^b, & (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{in} \subset \partial \Omega \times [0, T], & \varphi_l = \varphi_l^0, & \mathbf{x} \in \Omega, t = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где φ_l — концентрация l -й примеси из набора φ ; φ_l^b — фоновые значения концентрации; φ_l^0 — начальное распределение концентрации; \mathbf{n} — вектор внешней нормали; вектор скорости движения воздушных масс \mathbf{u} и коэффициент диффузии μ рассчитываются с помощью моделей гидротермодинамики атмосферы; переменная \mathbf{f} характеризует априорную мощность источников примесей, \mathbf{r} — неопределенность в источниках из некоторого множества F ; функции $P_l(t, \varphi)$ и $\Pi_l(t, \varphi)$ описывают процессы деструкции и продукции соответственно; Γ_{out} , Γ_{in} — участки границы области, на которых скорость ветра направлена из

области и внутрь нее соответственно. На основе модели (4) поставим прямую и обратную задачи.

В прямой задаче заданы функции \mathbf{f} , \mathbf{g} , \mathbf{r} , φ^0 , φ^b , μ . Требуется определить φ из (4). Пусть $\varphi[\mathbf{r}]$ — решение прямой задачи.

Для постановки обратной задачи поиска источников предположим, что неопределенность $\mathbf{r}^{(*)} \in F$ неизвестна, однако даны зашумленные значения функции состояния в некотором наборе точек области $\omega_{mes} \subset \Omega$ для набора элементов функции состояния L_{mes} , измеряемых системой мониторинга:

$$\varphi_\eta[\mathbf{r}^{(*)}](\chi, t) = \psi_{\chi\eta}(t) + \delta\psi_{\chi\eta}(t), \quad t \in [0, T], \quad (\chi, \eta) \in \omega_{mes} \times L_{mes}. \quad (5)$$

Здесь $\delta\psi_{\chi\eta}$ — погрешность измерения (в описываемых численных экспериментах не учитывается).

В обратной задаче заданы функции \mathbf{f} , \mathbf{g} , φ^0 , φ^b , μ , ψ . Требуется определить $\mathbf{r}^{(*)}$, $\varphi^{(*)} = \varphi[\mathbf{r}^{(*)}]$ из (5).

Для того чтобы получить решение данной задачи, рассмотрим соотношение чувствительности результатов измерений к вариациям источников. Для любых векторов $\mathbf{h} \in U_{mes}$, $\mathbf{r}^{(2)} \in F$, $\mathbf{r}^{(1)} \in F$ выполнено соотношение

$$\langle A(\mathbf{r}^{(2)}) - A(\mathbf{r}^{(1)}), \mathbf{h} \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}^{N_c})} = \langle \varphi^*[\mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{r}^{(1)}; \mathbf{h}], \mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)} \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}^{N_c})}, \quad (6)$$

где U_{mes} — множество вектор-функций $L_2(\Omega_T; \mathbb{R}^{N_c})$ с ненулевыми компонентами, соответствующими индексам L_{mes} ,

$$A: \quad F \rightarrow L_2(\Omega_T; \mathbb{R}^{N_c}), \quad \mathbf{r} \mapsto \left[\begin{array}{l} \varphi_l[\mathbf{r}], \quad l \in L_{mes}, \\ 0, \quad l \notin L_{mes} \end{array} \right]_{l=1}^{N_c},$$

$\varphi^*[\mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{r}^{(1)}; \mathbf{h}]$ — решение сопряженной задачи в следующей формулировке:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \varphi_l^*}{\partial t} - \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi_l^* - \nabla \cdot (\mu \nabla \varphi_l^*) + (G(t, \varphi[\mathbf{r}^{(2)}], \varphi[\mathbf{r}^{(1)}])\varphi^*)_l &= h_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega_T, \\ \varphi_l^* &= 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{in} \subset \partial\Omega \times [0, T], \\ (\mu \nabla \varphi_l^* - \mathbf{u} \varphi_l^*) \cdot \mathbf{n} + \beta \varphi_l^* &= 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{out} \subset \partial\Omega \times [0, T], \\ \varphi_l^* &= 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = T; \end{aligned}$$

$$G(t, \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}) = \text{diag}(P(t, \varphi^{(2)})) + \bar{\nabla} P(t, \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)})^* \text{diag}(\varphi^{(1)}) - \bar{\nabla} \Pi(t, \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)})^*. \quad (7)$$

В (7) индекс “*” обозначает сопряжение относительно взвешенного скалярного произведения в пространстве \mathbb{R}^{N_c} ; $\bar{\nabla}$ — оператор разделенных разностей, отображающий вектор-функцию $S: [0, T] \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c}$ на вектор-функцию $\bar{\nabla} S: [0, T] \times \mathbb{R}^{N_c} \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c \times N_c}$, причем для любых $t \in [0, T]$ и $\{\varphi, \delta\varphi\} \in \mathbb{R}^{N_c}$ выполняется равенство

$$S(t, \varphi + \delta\varphi) - S(t, \varphi) = \bar{\nabla} S(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi.$$

Если, следуя работе [8], выбрать некоторое конечное множество функций проектирования $\{\mathbf{h}^{(\xi)}\}_{\xi=1}^{\Xi} = U \subset U_{mes}$ и для каждой из этих функций записать соотношения (6), то для любого \mathbf{r} выполняются соотношения

$$\psi_U - A_U(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_U[\mathbf{r}^{(*)}, \mathbf{r}](\mathbf{r}^{(*)} - \mathbf{r}) + \delta\psi_U, \quad (8)$$

где $\mathbf{r}^{(*)}$ — точное решение обратной задачи,

$$\mathbf{M}_U[\mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{r}^{(1)}]: \quad \begin{cases} F \rightarrow \mathbb{R}^{\Xi}, \\ \mathbf{r} \mapsto \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle \varphi^*[\mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{r}^{(1)}; \mathbf{h}^{(\xi)}], \mathbf{r} \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}^{N_c})} \mathbf{e}^{(\xi)}, \end{cases}$$

$$A_U(\mathbf{r}) = \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle A(\mathbf{r}), \mathbf{h}^{(\xi)} \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} \mathbf{e}^{(\xi)}, \quad \psi_U = \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle \psi, \mathbf{h}^{(\xi)} \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} \mathbf{e}^{(\xi)},$$

$$A_U(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) - A_U(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_U[\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}, \mathbf{r}] \delta \mathbf{r},$$

$\mathbf{e}^{(\xi)}$ — элемент канонического базиса в пространстве \mathbb{R}^Ξ .

С учетом тождества (8) и свойств сингулярного разложения можно сделать вывод, что проектор на линейную оболочку правых сингулярных векторов оператора чувствительности, соответствующих ненулевым сингулярным числам, позволяет оценить, какая часть информации о разности $\mathbf{r}^{(*)} - \mathbf{r}$ теряется, а какая остается в спроектированных на U данных измерений и потенциально может быть восстановлена. Эта оценка малоприменима при обработке реальных данных, поскольку точное значение оператора чувствительности $\mathbf{M}_U[\mathbf{r}^{(*)}, \mathbf{r}]$ при решении обратной задачи неизвестно; однако она может быть использована при численном исследовании алгоритмов решения обратных задач. Если оператор чувствительности $\mathbf{M}_U[\mathbf{r}^{(*)}, \mathbf{r}]$ слабо зависит от $\mathbf{r}^{(*)}$, то для получения оценки можно использовать оператор $\mathbf{M}_U[\mathbf{r}, \mathbf{r}]$, который вычисляется при решении обратной задачи.

В качестве множества для проектирования U рассмотрим произведения элементов начального отрезка косинус-базиса по времени, упорядоченного по возрастанию частот, и дельта-функций по пространству, локализованных в точках, где проводятся измерения:

$$U_\Theta = \{e_{\eta\chi\theta} \mid (\eta, \chi) \in L_{mes} \times \omega_{mes}, 0 \leq \theta \leq \Theta\},$$

$$e_{\eta\chi\theta} = \delta(x-\chi) \left[\begin{array}{c} \rho_\eta^{-1/2} C(T, \theta, t), \quad l = \eta, \\ 0, \quad l \neq \eta, \end{array} \right]_{l=1}^{N_c}, \quad C(T, \theta, t) = \frac{1}{\sqrt{T}} \begin{cases} \sqrt{2} \cos(\pi\theta t/T), & \theta > 0, \\ 1, & \theta = 0. \end{cases}$$

При решении задачи (8) применен алгоритм типа алгоритма Ньютона — Канторовича, основанный на усеченном сингулярном разложении [9], но с использованием правых псевдообратных матриц.

3. Численные эксперименты для Новосибирской агломерации. Описанный в п. 2 алгоритм применен для решения обратной задачи поиска источников примесей в области, занимаемой Новосибирской агломерацией. При описании химических превращений примесей использована модифицированная модель [10; 11. С. 549], включающая 20 уравнений реакций для 23 веществ, в том числе для оксида азота (NO) и озона (O₃). Скорости фотохимических реакций зависят от времени суток.

Для расчета метеорологических параметров (компонент скорости ветра, коэффициентов диффузии), используемых в модели переноса химических веществ, применялась модель исследования и прогнозирования погоды (модель WRF) [12]. Расчеты проводились для двух областей. Для первой области (D1) горизонтальный шаг сетки составлял 1380 м и включал 30 вертикальных уровней до значения давления, равного 50 ГПа. Для второй, вложенной области (D2), соответствующей Новосибирской агломерации в пределах координат $54,75 \div 55,16^\circ$ с.ш., $82,66 \div 83,37^\circ$ в.д. (99×99 точек), горизонтальный шаг сетки составлял 460 м и включал 30 вертикальных уровней до значения давления, равного 50 ГПа. Для расчета параметров, соответствующих вложенной области D2, применялась схема масштабирования one-way nesting. В вычислительных экспериментах использовался адаптивный временной шаг. Начальные и граничные условия при расчете полей метеорологических параметров в области D1 уточнялись с помощью данных оперативной глобальной модели NOAA/NCEP (Национальное управление океанических и атмосферных исследований / Национальный центр прогнозирования состояния окружающей среды, США) с временным шагом, равным 6 ч, и горизонтальным разрешением, составляющим $0,5^\circ$.

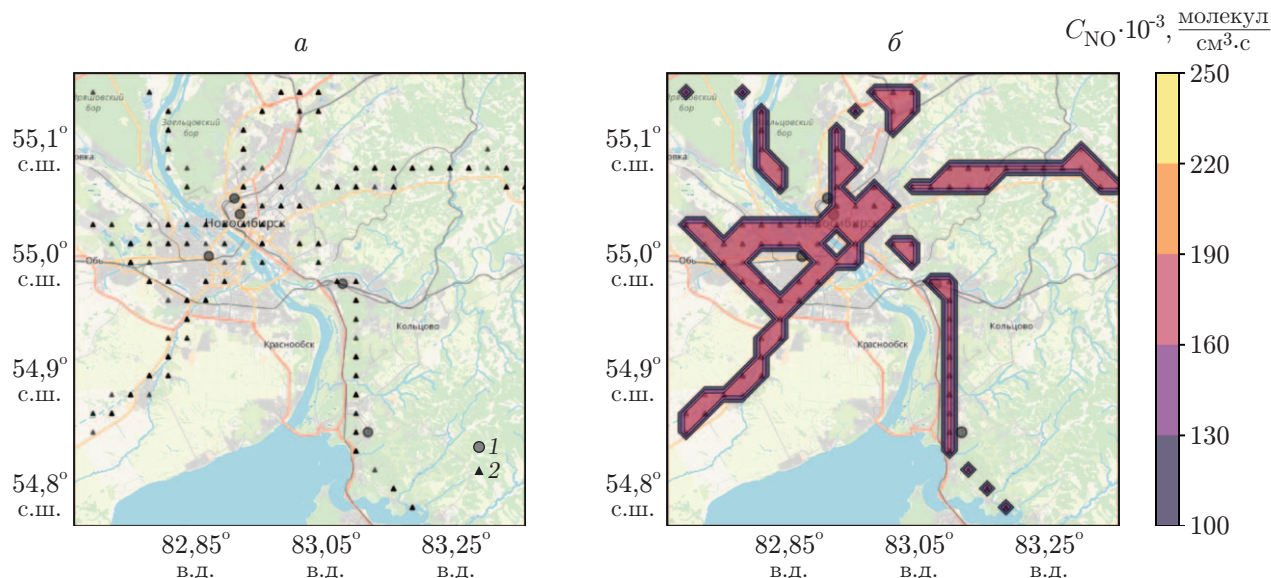


Рис. 1. Результаты моделирования загрязнения оксидом азота NO Новосибирской агломерации:

a — область моделирования и положение станций мониторинга и источников примесей (1 — пять из числа действующих в Новосибирске станций мониторинга, находящихся в области D2. Данные мониторинга с этих станций доступны в виде рядов по времени, составленных из концентраций некоторых веществ. В сценариях вместо реальных данных мониторинга используются данные, полученные в результате решения прямой задачи (4) с заданным “точным” распределением функции источника оксида азота (NO), соответствующего автомобильному транспорту на дорогах г. Новосибирска (рис. 1, *б*). Решение прямой задачи в виде временных рядов в пяти точках, где находятся станции мониторинга, приняты в качестве результатов мониторинга, по которым требуется восстановить “точный” источник.

В сценариях, построенных на основе данных, приведенных в [13, 14], рассмотрен конкретный временной интервал, в котором воспроизводилась реально изменяющаяся метеорологическая ситуация. При этом происходили процессы переноса и трансформации примесей. На рис. 1, *a* точками 1 отмечены пять из числа действующих в Новосибирске станций мониторинга, находящихся в области D2. Данные мониторинга с этих станций доступны в виде рядов по времени, составленных из концентраций некоторых веществ. В сценариях вместо реальных данных мониторинга используются данные, полученные в результате решения прямой задачи (4) с заданным “точным” распределением функции источника оксида азота (NO), соответствующего автомобильному транспорту на дорогах г. Новосибирска (рис. 1, *б*). Решение прямой задачи в виде временных рядов в пяти точках, где находятся станции мониторинга, приняты в качестве результатов мониторинга, по которым требуется восстановить “точный” источник.

Рассматриваются два сценария. При использовании первого сценария “измерялась” концентрация NO (рис. 2, *a, б*), при использовании второго — концентрация озона O_3 (рис. 2, *в, г*). По отношению к веществам, выбрасываемым источниками, озон является вторичным загрязнителем, возникающим в процессе превращения других веществ в атмосфере. Поэтому поиск источника NO по концентрациям озона классифицируется как поиск по косвенным данным.

Начальное приближение для искомого источника принято нулевым. Количество элементов косинус-базиса $\Theta = 10$, поэтому количество функций проектирования $\Xi = 5 \times 10$. При решении обратной задачи использовалась пространственная сетка размером 25×25 точек.

На рис. 2, *a, в* представлены значения проекции “точного” решения (см. рис. 1, *б*) на линейную оболочку правых сингулярных векторов оператора чувствительности, соответствующих ненулевым сингулярным числам этого оператора. Данную проекцию можно

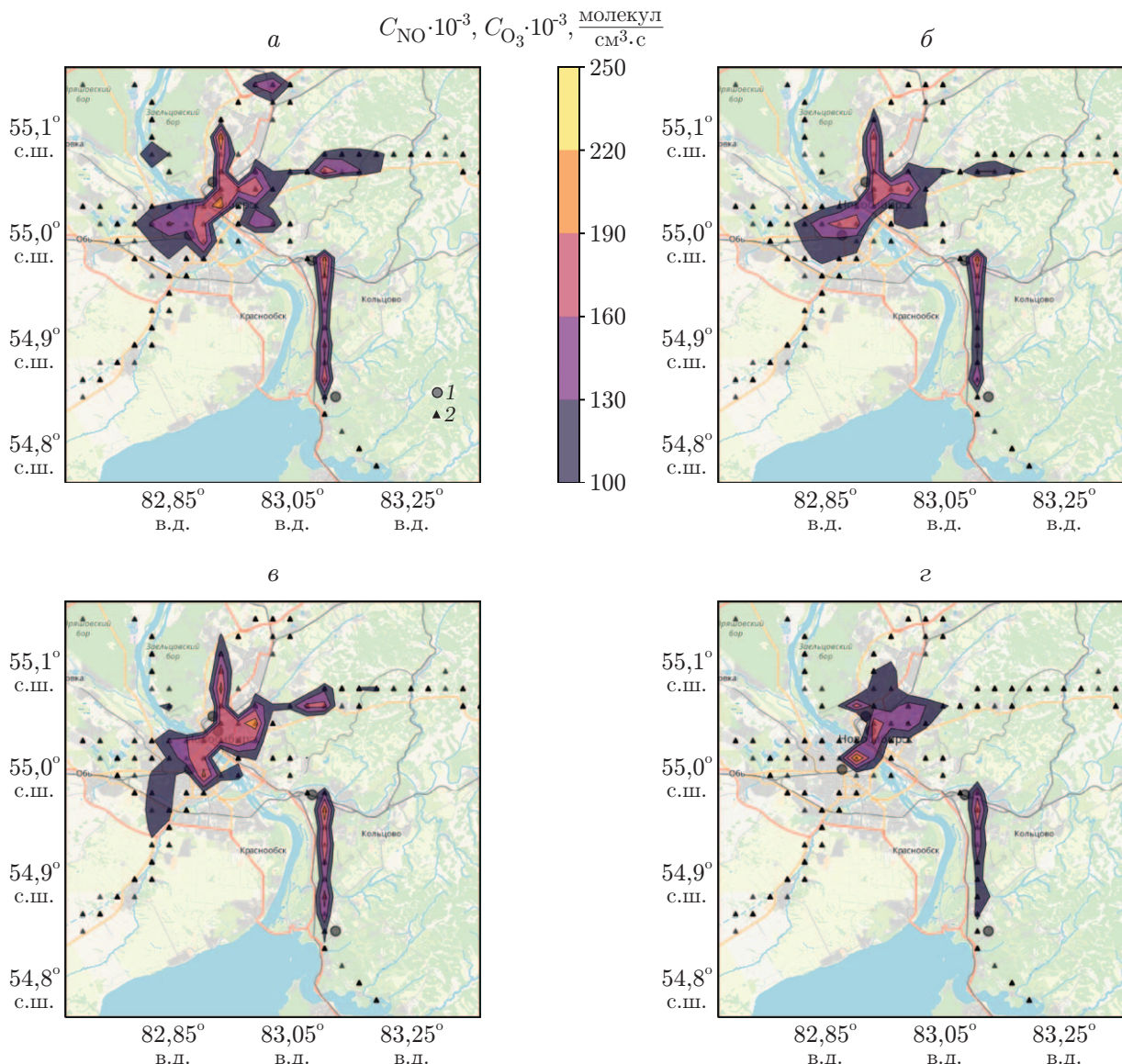


Рис. 2. Восстановление источника NO по результатам измерений концентраций NO (а, б) и концентраций O₃ (в, г):

а, в — “видимый” источник, б, г — источник, восстановленный по результатам решения обратной задачи; 1 — пять из числа действующих в Новосибирске станций мониторинга, 2 — положение источников NO (а, б) и O₃ (в, г), соответствующих автотранспорту

интерпретировать как функцию источника, “видимого” системой мониторинга. Она позволяет оценить принципиальную возможность решения обратной задачи.

Результаты восстановления источника при решении обратной задачи в соответствии с рассмотренными выше сценариями представлены на рис. 2,б,г.

Результаты анализа показывают, что в рассмотренных сценариях алгоритм позволяет оценить расположение источников. Результат восстановления источника выброса вещества при проведении прямых измерений его концентраций оказался более точным, чем при использовании косвенных данных. Полученные различия можно объяснить тем, что озон присутствует в системе в качестве вторичного загрязнителя. Заметим, что задача обнаружения источников по косвенным данным является более актуальной с практической точки зрения, особенно в критических ситуациях.

Заключение. В работе развиты методы теории чувствительности для моделей гидротермодинамики и химии атмосферы. Представлен пример их использования при решении и исследовании обратных задач природоохранной тематики. Заметим, что исследование чувствительности может оказать существенное влияние на эффективность и качество решения различных технических, медицинских, биологических, социальных и других задач.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Марчук Г. И.** Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.
2. **Пененко В. В.** Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981.
3. **Penenko V. V., Tsvetova E. A.** A variational approach to environmental and climatic problems of urban agglomeration // IOP Conf. Ser. Earth Environ. Sci. 2016. V. 48. 012020. DOI: 10.1088/1755-1315/48/1/012020.
4. **Пененко В. В., Пененко А. В., Цветова Е. А.** Вариационный подход к исследованию процессов геофизической гидротермодинамики с усвоением данных наблюдений // ПМТФ. 2017. Т. 58, № 5. С. 17–25. DOI: 10.15372/PMTF20170502.
5. **Levy P.** Problemes concrets d'analyse fonctionnelle. P.: Gauthier-Villars, 1951.
6. **Ладыженская О. А.** Краевые задачи математической физики. М.: Наука, 1973.
7. **Bryson A. E.** Applied optimal control: optimization, estimation, and control / A. E. Bryson, Y. Ho. Waltham: Blaisdell, 1969.
8. **Марчук Г. И.** О постановке некоторых обратных задач // Докл. АН СССР. 1964. Т. 156. С. 503–506.
9. **Пененко А., Николаев С., Голушко С. и др.** Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии // Мат. биология и биоинформатика. 2016. Т. 11. С. 426–444.
10. **Stockwell W. R., Goliff W. S.** Comment on “Simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm” by R. K. Srivastava et al. // J. Geophys. Res. 2002. V. 107, N D22. P. 4643–4650.
11. **Visscher A. De.** Air dispersion modeling: foundations and applications. Hoboken: John Wiley and Sons Inc., 2013.
12. **Grell G. A., Peckham S. E., Schmitz R., et al.** Fully coupled online chemistry within the WRF model // Atmospher. Environ. 2005. V. 39. P. 6957–6975.
13. **Обзор** состояния окружающей среды в городе Новосибирске за 2014 год. [Электрон. ресурс]. Режим доступа: http://www.degkh.ru/ecology/overview_of_the_environment_in_novosibirsk/2014_obzor.pdf.
14. **Пененко А., Мукатова Ж., Пененко В. и др.** Численное исследование прямого вариационного алгоритма усвоения данных в городских условиях // Оптика атмосферы и океана. 2018. Т. 31. С. 456–462.

*Поступила в редакцию 29/X 2018 г.,
после доработки — 29/X 2018 г.
Принята к публикации 29/X 2018 г.*