Вычислительные технологии **Том 11, часть 2, Специальный выпуск, 2006**

КАЧЕСТВО ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ: ОБНАРУЖЕНИЕ ИСТОЧНИКОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ И ОЦЕНКА ЭМИССИИ*

В. В. Пененко, Е. А. Цветова

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

e-mail: Penenko@sscc.ru, E.Tsvetova@ommgp.sscc.ru

A general structure of methods which bring together mathematical models of processes and observational data for the identification of sources of pollution and quality control of the atmosphere is presented. Models and observations are combined in a uniform structure using the variational principles. A new approach for detection of unknown sources is proposed. Sensitivity relations for the observational functionals as well as indicative observability functions are used. Measured data and models of processes in the inverse mode are applied. The set of algorithms is described allowing to relate the cost functionals and the atmospheric quality restrictions with the emission control strategy.

Введение

Хорошее качество окружающей среды является важным условием нормального развития общества. Наиболее сложно обеспечивать и сохранять приемлемое качество окружающей среды в индустриально нагруженных регионах и городах. Для слежения за состоянием компонентов природной среды (воздуха, воды, почвы и т. д.) разрабатываются различные системы мониторинга, включающие средства, позволяющие производить контактные и дистанционные наблюдения. Однако существующие системы мониторинга не могут удовлетворительно обеспечить фактической информацией даже диагностику текущего состояния, не говоря уже о прогнозировании и организации природоохранных стратегий с оценкой их эффективности. Причин тому много. Если говорить об атмосфере, то одна из них обусловлена тем, что кроме первичных выбросов загрязняющих примесей из источников значительную роль в изменениях компонентного состава атмосферы играют вторичные продукты, появляющиеся в результате различных механизмов трансформации веществ в процессе их распространения.

Как связать данные об эмиссии загрязняющих примесей из источников с наблюдаемым в реальных условиях распределением и составом загрязняющих примесей в атмосфере?

*Работа выполняется при финансовой поддержке Программ фундаментальных исследований Президиума РАН (№ 16) и ОМН РАН (№ 1.3), Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-05-64562), Европейской комиссии (контракт № 013427).

Как найти неизвестные источники, являющиеся причиной загрязнений? Как сделать прогноз качества среды на длительный срок? Исчерпывающие ответы на эти вопросы пока не найдены. Но во всем мире активно ведутся поиски эффективных методов для решения этих задач. Для этой же цели в последние годы в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН разрабатывается специальная методика природоохранного прогнозирования и проектирования, основанная на совместном использовании математических моделей и данных наблюдений [1–5]. В настоящей статье представлен новый набор алгоритмов, дополняющий и развивающий эту методику.

1. Модели переноса и трансформации примесей

Рассмотрим математическую модель для описания процессов переноса и трансформации в атмосфере загрязняющих примесей в газовом и аэрозольном состояниях:

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

Здесь $\boldsymbol{\varphi} = \{\varphi_i(x,t), i = \overline{1,n}\} \in Q(D_t)$ — вектор-функция состояния, описывающая концентрации примесей в области $D_t = D \times [0, \bar{t}]$; $\mathbf{f} = \{f_i(\mathbf{x},t), i = \overline{1,n}\}$ — функции источников примесей; $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ — вектор скорости, в u_3 учывается скорость гравитационного осаждения примесей; $\mu_i = (\mu_1, \mu_2, \mu_3)_i$ — коэффициенты турбулентного обмена для субстанции φ_i в направлении координат $x = \{x_i\}$, $i = \overline{1,3}$; вид функции π определяется структурой вертикальной координаты в области D_t; $S(\boldsymbol{\varphi})$ — нелинейный матричный оператор, который описывает локальные процессы трансформации соответствующих субстанций. Функции источников примесей $f_i(\mathbf{x},t)$ зададим в виде

$$f_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{k=1}^{K_i} Q_{ik}\,(1 - e_{ik})\,\omega_{ik}(\mathbf{x}, t). \quad (2)$$

Здесь Q_{ik} — мощность источников; $\omega_{ik}(\mathbf{x},t)$ — конфигурация источников; K_i — количество источников, выбрасывающих примесь с номером i; e_{ik} — параметры регулирования источников. Область допустимых значений параметров регулирования определяем следующим образом: $0 \le e_{ik} \le e_{ik}^m \le 1$ $\left\{k = \overline{1, K_i},\ i = \overline{1,n}\right\}$, где e_{ik}^m — верхняя граница для каждого параметра.

Задача решается при начальных и граничных условиях

$$\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}, 0) = \boldsymbol{\varphi}^0(\mathbf{x}), \quad (\mathbf{x}) \in D; \quad R_b(\boldsymbol{\varphi})_i - f_{bi} = 0; \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega_t, \quad (3)$$

где $\boldsymbol{\varphi}^0(\mathbf{x})$ — априорная оценка состояния системы при $t = 0$; R_b — операторы граничных условий, а f_b — функции источников на границах Ω_t области D_t. Структура граничных условий является следствием физического содержания изучаемой проблемы. Все необходимые элементы гидродинамического фона для моделирования процессов переноса и трансформации примесей рассчитываются с помощью моделей динамики атмосферы. В (1) гидродинамический фон явно представляют функции u_i, μ_i, π.

Для построения системы моделирования используем следующие определения: функции состояния или переменные состояния $\boldsymbol{\varphi} = Q(D_t)$; сопряженные функции $\boldsymbol{\varphi}^* \in Q^*(D_t)$ — пространство функций, сопряженное по отношению к пространству функций состояния

$Q(D_t)$; параметры $\mathbf{Y} = \in R(D_t)$ — все функции и постоянные величины, участвующие в постановке задач и не являющиеся переменными состояния; $R(D_t)$ — область их допустимых значений; независимые переменные — пространственные координаты $\mathbf{x} = \left\{x_i,\, i = \overline{1,3}\right\}$, время t и переменная d, характеризующая размеры аэрозольных частиц $d_0 \leq d \leq d_{\max}$, $d \equiv x_4$; $(\mathbf{x}, t) \in D_t$.

2. Функционалы обобщенных характеристик процессов и моделей

Для обобщенных характеристик изучаемых процессов и решения различных задач с помощью математических моделей и фактических данных введем совокупность функционалов, определяя их как скалярные произведения:

$$\Phi_k(\boldsymbol{\varphi}) = \int\limits_{D_t} F_k(\boldsymbol{\varphi})\chi_k(x,t)dDdt = \left(F_k(\boldsymbol{\varphi}), \chi_k(x,t)\right)_{D_t}, k = \overline{1,K},\; K \geq 1, \tag{4}$$

где $F_k(\boldsymbol{\varphi})$ — функции заданного вида, определенные на множестве значений $\boldsymbol{\varphi} \in Q(D_t)$, ограниченные, суммируемые и дифференцируемые относительно функций состояния, параметров и независимых переменных; $\chi_k(x,t) \geq 0$ — весовые функции; $\chi_k(x,t) \in Q^*(D_t)$ и $\chi_k(x,t)dDdt$ — соответствующие меры Радона и Дирака [6], удовлетворяющие условиям нормировки:

$$\int\limits_{D_t} \chi_k(x,t)dDdt = 1. \tag{5}$$

Использование весовых функций и мер рассматриваемого класса для формирования функционалов имеет преимущество перед другими по двум обстоятельствам: 1) функционалы для изучения точечных и распределенных функций $F_k(\boldsymbol{\varphi})$ имеют одинаковую структуру; 2) эти объекты принадлежат пространству, сопряженному по отношению к пространству переменных состояния. Это удобно для организации вариационных принципов и построения сопряженных задач с использованием разнородной информации. При подходящем выборе оцениваемых $F_k(\boldsymbol{\varphi})$ и весовых функций с помощью функционалов этого типа можно единообразно описать глобальные, распределенные и локализованные характеристики поведения системы, экологические ограничения, результаты наблюдений различных типов, критерии: целевые, управления, проектирования, качества моделей, усвоения данных, идентификации параметров и др.

2.1. Модели наблюдений

Рассмотрим теперь способы включения данных наблюдений в систему моделирования. Чтобы данные наблюдений использовать в рамках вычислительных технологий совместно с моделями процессов, сформулируем математически функциональную зависимость между образами результатов измерений и функциями состояния изучаемых процессов. Для этих целей введем в рассмотрение "модели" наблюдений. Под этими объектами подразумеваются математические описания преобразований, ставящих в соответствие функциям состояния образы характеристик, которые измеряются наблюдательными приборами. Запишем эти зависимости формально в виде

$$\boldsymbol{\psi}_{mk} = \left[W(\boldsymbol{\varphi})\right]_{mk} + \boldsymbol{\eta}_{mk},\;\; k = \overline{1, K_m}, \tag{6}$$

где $\boldsymbol{\psi}_m$ — набор измеряемых величин; K_m — количество различных видов наблюдений; $\{W(\boldsymbol{\varphi})\}$ — совокупность моделей наблюдений; $\boldsymbol{\eta}$ — функции, которые вводятся для учета неопределенностей как самих моделей наблюдений, так и данных измерений сформулированных выше образов. Обычно значения наблюдений определяют на множестве точек $D_t^m \in D_t$. Символом $[\;]_m$ обозначены операции переноса информации с D_t на D_t^m. Эта процедура осуществляется с помощью или операций проектирования, или интерполяции. Мы строим систему моделирования так, чтобы можно было использовать всю доступную информацию от различных контактных и дистанционных наблюдательных систем. Некоторые типы моделей наблюдений для спутниковых, лидарных и микроволновых систем мониторинга рассмотрены в [3]. Представляется интересным использовать также данные наблюдений, полученных с беспилотных летательных аппаратов и с помощью дистанционного зондирования наземного базирования типа солнечных фотометров системы АЭРОНЕТ [7, 8]. Замечательное свойство наблюдений, дающих интегрированные по толще атмосферы характеристики, состоит в том, что их использование вместе с моделями в режиме обратного моделирования дает существенно бóльшие масштабы областей наблюдаемости, чем точечные наблюдения [5].

2.2. Функционалы для представления результатов наблюдений

Результаты наблюдений, описываемых с помощью совокупности моделей (7), можно рассматривать как функционалы. Их можно представить в виде

$$(\psi_m)_{ki} \equiv \Phi_{mki}(\boldsymbol{\varphi}) = \int\limits_{D_t} (W_{mk}(\boldsymbol{\varphi}))_i \, \chi_{mki}(\mathbf{x}, t) dDdt = (W_{mk}(\boldsymbol{\varphi}), \chi_{mk})_i; \tag{7}$$

$$\left\{k \in \overline{1, K_m},\, i \in i_k\right\} \equiv \left\{\alpha = \overline{1, M_0}\right\}. \tag{8}$$

Здесь k — номер типа наблюдений; i — номер наблюдения; i_k — множество номеров наблюдений типа k; M_0 — общее число наблюдений $(\psi_m)_{ki}$; α — текущий номер для упорядоченной системы наблюдений. Весовые функции $\chi_{mk}(\mathbf{x}, t)$ и соответствующие им меры определяются так же, как и в (5), но с обязательным условием: области носителей их ненулевых значений должны совпадать с пространственно-временной областью определения операторов моделей $W_{mk}(\boldsymbol{\varphi})$, которые участвуют при расчете образов измеряемых функций ψ_{mk}.

Для удобства дальнейшего изложения упорядочим все наблюдения и вместо двух индексов (k, i) введем один — α. Упорядочение проведем по мере убывания интенсивности измеряемых сигналов. Области с носителями ненулевых значений можно интерпретировать как рецепторы, в которых качество атмосферы измеряется в терминах величин ψ_{mk}. Функции состояния $\boldsymbol{\varphi}$ в рамках моделей процессов зависят от источников, параметров и других входных данных, поэтому функционалы (8) можно использовать при решении многих задач, таких, например, как оценка наблюдаемости территорий системами мониторинга, расположенными в рецепторах; обнаружение ненаблюдаемых непосредственно источников с использованием данных наблюдений ψ_{mk}; оценка рисков поступления примесей от источников в атмосферу области-рецептора за счет переносов и трансформации и др.

Главное назначение функционалов (8) при решении этих задач состоит в том, чтобы при их использовании вместе с моделями процессов (1) в режиме обратного моделирования связать информацию о результатах каждого конкретного наблюдения (7) с источниками и параметрами моделей (1). С помощью функций чувствительности (ФЧ) этих функционалов описывается пространственно-временная динамика взаимодействий типа рецептор — источник и строятся уравнения обратных связей.

2.3. Функционалы для усвоения данных

Для целей усвоения данных наблюдений и решения обратных задач введем функционал качества, выражающий суммарную меру невязок между измеренными и рассчитанными характеристиками изучаемого процесса:

$$\Phi_a(\varphi) = \sum_{k=1}^{K_m} \frac{1}{2} \int\limits_{D_t} \left(\boldsymbol{\eta}_k^T C_k \boldsymbol{\eta}_k\right) \chi_{mk}(\mathbf{x}, t) dD dt. \tag{9}$$

Вектор $\boldsymbol{\eta}_k = \boldsymbol{\psi}_{mk} - W_{mk}(\boldsymbol{\varphi})$ определяет невязку между измеренными значениями характеристик процесса и образами этих характеристик, вычисленными с помощью моделей процессов и соответствующих моделей наблюдений; индекс T обозначает операцию транспонирования; C_k — весовые матрицы для формирования скалярных произведений в пространстве измеряемых характеристик; χ_k — весовые функции распределения наблюдательных систем. Их носители отражают пространственно-временную локализацию систем наблюдений, а значения определяют долю вклада каждого наблюдения. Суммирование в (9) осуществляется по всем типам наблюдений, а интегрирование — по всей области D_t для всех типов наблюдений. Структура матриц C_k зависит от специфики данных измерений. Например, для дистанционных наблюдений (спутниковых, лидарных, фотометрических и др.) результаты измерений дифференцированы по частотам в спектральном диапазоне излучения. В этом случае скалярные произведения в (9) определяются по всему набору частот каждого типа наблюдений и весовые матрицы C_k вводятся для объединения всех наблюдений данного типа в рамках квадратичного функционала. При выборе конкретных значений элементов весовых матриц C_k и функций χ_k учитывается априорная информация об относительной “ценности” (адекватности) каждого наблюдения, чтобы “взвешивать” их вклад в (9).

2.4. Функционалы для учета ограничений

Чтобы конструктивно решать вопросы управления качеством атмосферы, необходимо сформулировать подходящим образом критерии оптимизации и ограничения на функции состояния и параметры системы [9]. Критерии для задач оптимизации природоохранной деятельности представим в виде функционалов (5), выбирая в соответствии с целями задач структуру оцениваемых и весовых функций. Для описания ограничений на практике используются различные способы. Нас интересует прежде всего эффективность алгоритмов учета ограничений на функции состояния при решении оптимизационных задач. Рассмотрим два основных способа.

1. *Глобальные ограничения по отношению к моделям процессов.* Запишем их с помощью функционалов типа (5)

$$\Phi_{ri}(\boldsymbol{\varphi}) = \int\limits_{D_t} F_{ri}(\boldsymbol{\varphi}) \chi_{ri}(\mathbf{x}, t) dD dt \leq 0, i = \overline{1, n_1}, \tag{10}$$

где $F_{ri}(\boldsymbol{\varphi})$ — функции, описывающие суть ограничений; $\chi_{ri}(\mathbf{x},t) \geq 0$ — весовые функции; n_1 — общее число таких ограничений.

2. *Распределенные по области D_t ограничения.* К этому типу ограничений можно отнести, например, условия соблюдения стандартов качества окружающей среды, уровней экологической безопасности для человека и элементов биосферы и др. Распределенные ограничения записываются обычно в виде неравенств

$$q_i(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x},t)) \leq 0,\ (\mathbf{x},t) \in D_{t,}\ i = \overline{1,n_2}. \tag{11}$$

Математические модели процессов и функции состояния в дискретном представлении имеют сверхвысокую размерность. В этих условиях ограничения в виде (11) можно рассматривать только теоретически. Для конструктивной работы с ограничениями в режиме прямого и обратного моделирования при реализации оптимизационных задач представим распределенные ограничения в эквивалентной интегральной форме вида (10). Для этого несколько модифицируем функции q_i в (11): $\tilde{q}_i = q_i + \varepsilon_i$, добавляя к ним малые положительные параметры ε_i, и определим новые функции вида

$$\tilde{F}_{ri}(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x},t)) = \frac{1}{4}\left(\tilde{q}_i + |\tilde{q}_i|\right)^2, \tag{12}$$

равные нулю при $\tilde{q}_i \leq 0$ и положительные при $\tilde{q}_i > 0$, т. е. при нарушении модифицированных ограничений (11). Параметры ε_i вводятся для того, чтобы при численном решении задач ослабить влияние неопределенностей аппроксимации в окрестностях границ смены знака функции ограничений q_i. Окончательно эквивалентная форма ограничений (11) записывается в виде глобального функционала типа (5), (10), но со строгим равенством

$$\Phi_{ri}(\boldsymbol{\varphi}) = \int\limits_{D_t} \tilde{F}_{ri}(\boldsymbol{\varphi})\chi_{ri}(\mathbf{x},t)dDdt = 0, i = \overline{1,n_2}. \tag{13}$$

Ограничения (10) и (13) упорядочиваются совместно ($n_3 = n_1 + n_2$). При таком подходе к учету распределенных ограничений снимается стресс, обусловленный необходимостью работать с моделями высокой размерности. Но при построении соотношений чувствительности для функционалов ограничений требуется определить операции обобщенного дифференцирования функций $\tilde{F}_{ri}(\boldsymbol{\varphi})$ относительно функций состояния. Ограничения на параметры моделей, не содержащие явно функций состояния, записываются также в виде скалярных произведений в пространстве параметров $R(D_t)$ и учитываются на этапе формирования соотношений чувствительности моделей и функционалов.

Таким образом, мы сформировали все элементы, необходимые для системы моделирования. Все они записываются в виде функционалов, выражаемых интегралами по области D_t с неотрицательными подынтегральными выражениями и с нормированными весовыми функциями из соответствующих сопряженных пространств.

Далее, следуя [1, 2], формируются вариационные принципы для оценок построенной совокупности функционалов. Основная цель вариационных принципов – нахождение стационарных значений функционалов по отношению к вариациям функций состояния, сопряженных функций и некоторых параметров. Решения этих задач получаются с помощью комплекса алгоритмов прямого и обратного моделирования и расчета функций чувствительности для функционалов типа (5)–(13). Все конструкции, описанные выше, специально подведены под стандарт этой методики и комплекса алгоритмов. Это дает возможность по единому формату строить и решать прямые и сопряженные задачи, после их решения рассчитывать соотношения и ФЧ для всех функционалов.

По соотношениям чувствительности для функционалов (10), (13) формируются линейные многообразия для переноса ограничений на искомые параметры системы. При таком подходе к учету ограничений ФЧ замыкают на себя все внутренние степени свободы моделей и функций состояния. В результате оптимизационные алгоритмы работают только с внешними степенями свободы, связанными с искомыми параметрами.

Поскольку основы методики прямого и обратного моделирования подробно изложены в [1–4, 9], описания вариационных принципов и порождаемых ими комплексов численных моделей и алгоритмов здесь не даны. Далее представлена структура нового набора алгоритмов для задач обнаружения не наблюдаемых непосредственно источников загрязняющих примесей по данным измерений концентраций системами мониторинга.

3. Алгоритмы поиска источников и оценки параметров

Поиск источников загрязнений и оценки эмиссионных параметров этих источников являются важными задачами экологических исследований. Для их решения многие исследователи привлекают сопряженные уравнения. Использование сопряженных задач для анализа сложных систем и интерпретации данных наблюдений как скалярных произведений с сопряженными функциями предложено Г.И. Марчуком [10]. На базе развитого им подхода исследования по поиску источников с использованием описания наблюдений в виде линейных функционалов выполнены в работах [11 – 13].

Развитие методики совместного использования моделей и данных наблюдений на основе вариационных принципов и методов теории чувствительности представлено в [1 – 4].

В работе [4] в алгоритмы поиска неизвестных источников мы ввели новые элементы, а именно индикаторные функции для оценок степени наблюдаемости территорий. Здесь мы развиваем эту идею для любых наблюдений, описываемых функционалами общего вида, и излагаем структуру методов решения возникающих при этом математических задач. Итак, используются модели наблюдений и данных, представленных набором функционалов (8). Алгоритмы обнаружения местоположения источников в пространстве и определение момента выброса ими примесей имеют интерактивный характер с последовательным включением данных наблюдений. Поэтому функционалы (8) были упорядочены по мере убывания интенсивности измеряемых сигналов. Сначала выбирается некоторое множество наиболее информативных в этом смысле функционалов с общим количеством $M \le M_0$. Это множество по мере необходимости может пополняться. Рассчитывая соотношения чувствительности для этих функционалов, получим

$$(\delta \boldsymbol{\psi}_m)_\alpha = \delta \Phi_{m\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) = (\mathrm{grad}_{\mathbf{Y}} \Phi_{m\alpha}(\boldsymbol{\varphi}), \delta \mathbf{Y}) \,, \tag{14}$$

где символом δ обозначены вариации соответствующих объектов; $\alpha = \overline{1, M}$; $\mathrm{grad}_{\mathbf{Y}} \Phi_{m\alpha}(\boldsymbol{\varphi}) \equiv \Gamma_\alpha$ — набор ФЧ функционала $\Phi_{m\alpha}(\boldsymbol{\varphi})$ по отношению к вариациям входных параметров $\mathbf{Y}$, а скалярные произведения определяются в рамках соответствующего вариационного принципа через дискретный аналог интегрального тождества вариационной формулировки моделей (1)–(3) [1, 2, 5] .

Поскольку нас интересует чувствительность по отношению к вариациям параметров источников, предположим, что вариации других параметров отсутствуют. Тогда соотношения (14) примут вид

$$(\delta \boldsymbol{\psi}_m)_\alpha = (\Gamma_\alpha(\mathbf{x}, t), \delta \mathbf{f}). \tag{15}$$

Заметим, что в случае линейных моделей процессов, линейных моделей наблюдений и линейных по отношению к функциям состояния функционалов совокупности (8) соотношения (15) можно записать не только для вариаций $\delta\psi_m$ и δf, но и для самих величин ψ_m и f. Но самое главное, что в линейном случае для построения соотношений (15) не нужно решать прямые задачи, которые требуют знания всех входных данных, включая источники. В силу условий стационарности линеаризованных функционалов относительно вариаций функции состояния сопряженные задачи получаются формально не зависящими от решения прямых задач. Следовательно, для получения соотношений (15) достаточно решить только совокупность сопряженных задач для (8) и по ним определить ФЧ всех функционалов наблюдений по отношению к источникам.

Учитывая этот факт, для решения задач обнаружения источников сначала используем линеаризованный вариант моделей процессов, например, линеаризуя или исключая нелинейные механизмы трансформации в операторах $S\boldsymbol{\varphi}$ из (1). Далее возьмем линеаризованный вариант модели (7) для расчета образов наблюдаемых величин. Строим вариационные принципы для линеаризованных таким образом моделей процессов и всех линейных функционалов наблюдений. Получаем из этих принципов сопряженные задачи, решаем их и определяем соотношения

$$(\boldsymbol{\psi}_m)_\alpha = (\Gamma_\alpha(\mathbf{x},t), \mathbf{f}). \tag{16}$$

Поскольку для расчета этих соотношений использовались модели наблюдений и функционалы с их участием, в левой части (16) находятся образы измеряемых величин. Подставляя в левую часть вместо этих образов результаты самих измерений, получим систему линейных уравнений для приближенной оценки вектора $\mathbf{f}$. Система уравнений (16) для нахождения искомых параметров $\mathbf{f}$, распределенных в области D_t, в общем случае сильно недоопределена, т. е. число наблюдений M_0 значительно меньше, чем число узлов сеточной области D_t^h, где задана функция источников моделей (1). Поскольку необходимо найти источники с неизвестными координатами и временами действия, приходится рассматривать все множество D_t^h.

Напрашивается вывод: нужно уменьшить область поиска и делать это направленно. Здесь могут помочь функции чувствительности и построенные на их основе индикаторные функции, которые несут информацию о степени наблюдаемости в случае распределенной наблюдательной сети. Естественно, при этом предполагается, что модели процессов адекватно описывают реальные ситуации в атмосфере. Другими словами, источники, сигналы от которых зафиксированы измерениями, следует искать на территориях, которые попадают в область наблюдаемости. Для количественной интерпретации понятия наблюдаемости введем в рассмотрение функции, описывающие носитель ФЧ в диапазоне значений выше заданного уровня значимости

$$\operatorname*{supp}_{\varepsilon_k} \Gamma_\alpha(\mathbf{x},t) \equiv H_{\alpha k}(\Gamma_\alpha(\mathbf{x},t), \varepsilon_k) = \begin{cases} 1, & |\Gamma_\alpha| \geq \varepsilon_k, \\ 0, & |\Gamma_\alpha| < \varepsilon_k, \end{cases} \tag{17}$$

т. е. области, где $|\Gamma_\alpha| < \varepsilon_k$ не учитываются, так как относительный вклад расположенных в них источников в измеренные значения функционала несуществен. Для надежности оценок будем просматривать некоторый интервал диапазона значимости $\varepsilon_{\min} \leq \varepsilon_k \leq \varepsilon_{\max}$.

Таким образом, пара функций $\{\Gamma_\alpha, H_{\alpha k}\}$ дает оценку области наблюдаемости с помощью системы мониторинга, расположенной в рецепторах и обеспечившей измерение величины функционала ψ_α. При этом $H_{\alpha k}$ дает конфигурацию области, где могут быть источники, сигнал от которых поступает в измерительную систему и суммируется в ψ_α.

Соответственно, функция Γ_α характеризует долю вклада каждого источника, локализованного в точке $(\mathbf{x}, t) \in D_t$, в суммарное значение ψ_α.

Определим теперь общую функцию наблюдаемости источников для всех функционалов наблюдений:

$$H_\Sigma(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^{M} H_{\alpha k}(\Gamma_\alpha(\mathbf{x}, t), \varepsilon_k). \tag{18}$$

По построению функция $H_\Sigma(\mathbf{x}, t)$ может принимать только целочисленные значения в диапазоне $0 \le H_\Sigma(\mathbf{x}, t) \le M$, где M — общее число наблюдателей или рецепторов, участвующих в поиске. Следовательно, функция $H_\Sigma(\mathbf{x}, t)$ дает информацию для районирования области D_t по степени наблюдаемости распределенных в ней источников с помощью совокупности станций мониторинга. Например, подобласть из D_t, на которую приходится носитель функции со значениями $H_\Sigma(\mathbf{x}, t) = M$, попадает в "поле зрения" всех станций, участвующих своими измерениями ψ_α, $\alpha = \overline{1, M}$. Аналогично подобласти, соответствующие носителю функции $H_\Sigma(\mathbf{x}, t)$ со значениями $H_\Sigma(\mathbf{x}, t) = 0$, оказываются вне "поля зрения" всех наблюдателей. Анализируя таким образом области носителей функции $H_\Sigma(\mathbf{x}, t)$ для всех промежуточных значений диапазона наблюдаемости от 0 до M, можно идентифицировать взаимно композиции функционалов-наблюдателей (рецепторов) и области, содержащие источники, сигналы от которых зафиксированы в соответствующих сочетаниях функционалов наблюдений.

Развиваемая нами технология моделирования на базе вариационных принципов и аппарате теории чувствительности моделей и функционалов позволяет такой анализ осуществлять интерактивно, при этом можно по мере необходимости вводить новые функционалы наблюдений. Правила выбора должны учитывать интенсивность сигнала наблюдений, т. е. количественные значения самих функционалов, конфигурацию функций наблюдаемости и степень независимости ФЧ в соотношениях (15) или (16). После такой интерактивной идентификации взаимосвязей между функционалами-рецепторами и подобластями-источниками возмущений можно перейти к непосредственному анализу соотношений чувствительности (15) и (16) для нахождения параметров источников.

Рассмотрим соотношение (16) как систему линейных уравнений относительно искомых компонентов функции $\mathbf{f}$. Перепишем их в виде

$$\Gamma \mathbf{f} = \boldsymbol{\psi}, \tag{19}$$

где $\Gamma = \{\Gamma_\alpha(\mathbf{x}, t) \in R_N\}$, $\alpha = \overline{1, M}$, представляет собой прямоугольную $(M \times N)$-матрицу, составленную из ФЧ; R_N — вещественное пространство вектор-строк размерности N. Параметр N определяется числом компонент в вектор-строках ФЧ и вектор-столбцах функции источников $\mathbf{f}$, определенных в узлах дискретной сеточной области D_t^h с учетом анализа наблюдаемости и предварительной оценки обнаружения координат источников. То есть строится система последовательного обнаружения источников на основе данных районирования территорий по степени наблюдаемости, что позволяет сузить область поиска, фокусируя его на областях возможного расположения источников.

Если система (19) переопределена, $M > N$, т. е. число наблюдений больше, чем число искомых параметров источников, то ее решения получаются с помощью метода наименьших квадратов или первой (левой) трансформации Гаусса [14]. В обоих случаях задача сводится к решению системы вида

$$\Gamma^T V \Gamma \mathbf{f} = \Gamma^T V \boldsymbol{\psi}, \tag{20}$$

где V — некоторая диагональная весовая матрица с положительными элементами, которая вводится с учетом имеющейся априорной информации для улучшения обусловленности задачи. В зависимости от величины параметра N система (20) решается либо прямыми алгоритмами, либо итерациями.

Когда система (19) недоопределена, $M < N$, т. е. число наблюдений меньше, чем количество искомых функций, решение получаем с помощью второй (правой) трансформации Гаусса [14]

$$\Gamma\Gamma^T \mathbf{X} = \boldsymbol{\psi}, \quad \mathbf{f} = \Gamma^T \mathbf{X}, \tag{21}$$

где $\Gamma\Gamma^T \equiv H$ — неотрицательно определенная $(M \times M)$-матрица Грама для совокупности векторов $\Gamma_\alpha(\mathbf{x}, t)$; $X \in R_M$ — решение вспомогательной задачи. Элементы матрицы Грама рассчитываются с помощью скалярного произведения (14). Обычно число функционалов-рецепторов определяется исследователем, и, как правило, оно оказывается не очень большим, так что систему (21) можно решать прямыми алгоритмами.

Анализ матрицы Грама H дополнительно дает информацию о ФЧ как об элементах векторного пространства. Например, ее минимальное собственное значение является мерой независимости векторов — ФЧ. Используя метод ортогональной декомпозиции [15], представим пространство, образованное векторами ФЧ в матрице Γ в виде набора ортогональных подпространств. С помощью этого представления естественно организовать процедуру планирования экспериментов по выбору областей-рецепторов исходя из меры информативности ФЧ в терминах главных компонент по отношению к построенному ортогональному базису. Это удобно, поскольку сами ФЧ определяются в четырехмерном пространстве высокой размерности, а с помощью ортогональной декомпозиции можно выделить наиболее существенную часть информации, присущую всей совокупности векторов в целом. Предварительно полученные таким образом оценки параметров и координат источников уточняются далее в процессе усвоения данных наблюдений на основе минимизации функционала качества (9).

Такой способ отличается от традиционных методов планирования экспериментов, которые базируются на изучении свойств информационной матрицы Фишера $\Gamma^T V \Gamma$ [16]. Он более информативен, поскольку здесь анализируется выбор рецепторов исходя из значимости функций наблюдаемости.

После того как найдено местоположение источников и их параметры, можно перейти к задачам управления и оптимального проектирования [9]. Обе эти задачи сводятся к нахождению параметров управления e_{ik} в представлении источников в формуле (2). Для этого задаются целевой функционал вида (4) и функционалы ограничений (10), (13). Окончательно задачи решаются итерационным методом. В цикле вычислений участвуют прямые задачи и сопряженные — для целевого функционала и функционалов ограничений.

Заключение

Представлена общая структура методов совместного использования моделей процессов и данных наблюдений для идентификации источников загрязняющих примесей и управления качеством атмосферы. Предложена замкнутая система алгоритмов, позволяющая связать целевые установки и ограничения на качество атмосферы с управлением эмиссией.

Список литературы

[1] Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981.

[2] Penenko V. Some aspects of mathematical modeling using the models together with observational data // Bull. Nov. Comp. Cent. 1996. N 4. P. 31–52.

[3] Пененко В.В. Вариационные принципы и оптимизация во взаимосвязанных задачах экологии и климата // Вычислительная математика и математическое моделирование. М.: Изд-во ИВМ РАН, 2000. Т. 1. С. 135–148.

[4] Penenko V., Baklanov A., Tsvetova E. Methods of sensitivity theory and inverse modeling for estimation of source parameters // FGCS. 2002. Vol. 18. P. 661–671.

[5] Penenko V., Tsvetova E. Variational technique for environmental risk/vulnerability assessment and control // Air, Water and Soil Quality Modelling for Risk and Impact Assessment. NATO Sci. Ser. Springer, 2006. (in press)

[6] Шварц Л. Анализ. М.: Мир, 1972.

[7] Holben B.N. et al. AERONET — A federated instrument network and data archive for aerosol characterization // Remote Sens. Environ. 1998. Vol. 66. P. 1–16.

[8] Сакерин С.М., Кабанов Д.М., Панченко М.В. и др. Результаты мониторинга атмосферного аэрозоля в азиатской части России по программе AEROSIBNET в 2004 г. // Оптика атмосферы и океана. 2005. Т. 18, № 11. С. 968–975.

[9] Пененко В.В. Численные модели и методы для решения задач экологического прогнозирования и проектирования // Обозрение прикладной и промышленной математики. 1994. Т. 1, вып. 6. С. 917–941.

[10] Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992. 335 с.

[11] Pudykiewicz J.A. Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters // Atmos. Environ. 1998. Vol. 32. P. 3039–3050.

[12] Issartel J.P. Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements // Atmos. Chem. Phys. Discuss. 2003. N 3. P. 3171–3203.

[13] Бородулин А.И., Десятков Б.М., Котлярова С.С. и др. Определение параметров источника атмосферных загрязнений с помощью мобильных пунктов мониторинга // Оптика атмосферы и океана. 2003. Т. 16, № 8. С. 765–768.

[14] Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. СПб.: Лань, 2002.

[15] Пененко В.В., Цветова Е.А. Главные факторы климатической системы глобального и регионального масштабов и их применение в экологических исследованиях // Оптика атмосферы и океана. 2003. Т. 16, № 5–6. С. 407–414.

[16] Ермаков С.М., Бродский В.З., Жиглявский А.А. и др. Математическая теория планирования эксперимента. М.: Наука, 1983.

Поступила в редакцию 9 ноября 2006 г.