

В.В. Пененко

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОВМЕСТНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ И МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ГИДРОТЕРМОДИНАМИКИ И ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск

Поступила в редакцию 3.03.99 г.

Принята к печати 15.03.99 г.

Обсуждаются методологические и алгоритмические аспекты объединения математических моделей с результатами наблюдений и экспериментальных исследований реальных процессов. Теоретическую основу таких конструкций составляют вариационные принципы и методы оптимизации применительно к совместным моделям гидротермодинамики атмосферы с моделями переноса и трансформации загрязняющих примесей. Для этого комплекса строятся соотношения теории чувствительности моделей и алгоритмы их реализации, позволяющие оценивать одновременно относительный вклад каждого из действующих факторов в вариации исследуемых или наблюдаемых характеристик процессов и тенденции их влияния.

Введение

Аспекты математического обеспечения комплексных исследований процессов переноса и трансформации загрязняющих примесей в условиях атмосферы Сибири изучают специалисты различных направлений [1]. Одна из основных целей – получение новых знаний об изучаемых процессах с помощью совместного использования математических моделей и данных лабораторных и натурных исследований и наблюдательных экспериментов. На базе полученных знаний предполагается формирование новых подходов к решению диагностических и прогностических задач.

Изучение процессов переноса и трансформации загрязняющих примесей в атмосфере имеет принципиальное значение для решения взаимосвязанных задач охраны окружающей среды, экологии и оценок изменений климата. Сейчас уже известно, что из множества возмущающих факторов в системе Земли (изменение режимов землепользования, индустриальная и хозяйственная деятельность и другие) в большей степени количественно оценены и документированы изменения в химическом составе атмосферы. Оценки показывают, что относительное содержание и общий баланс химически и оптически активных газов зависят не только от многообразия химических и фотохимических процессов и процессов переноса, но также и от обменных процессов между атмосферой и поверхностью Земли (водные объекты, океан, растительность), а особенно от эмиссии и осаждения примесей.

Значительный интерес представляют механизмы вторичного загрязнения природной среды продуктами трансформации первично выбрасываемых из источников веществ. Это обусловлено тем, что продукты трансформации могут быть более активными и токсичными, чем их предшественники, и представлять большую опасность для человека и экосистем. В первую очередь непосредственное влияние отмечается в локальном и мезомасштабах в городах и индустриальных регионах, где происходят выбросы. На климатических процессах это влияние сказыва-

ется опосредованно через взаимодействие газообразных примесей и аэрозолей с радиационными процессами в атмосфере.

В последнее время сделаны более определенные оценки климатической значимости аэрозолей в атмосфере:

– атмосферный аэрозоль имеет тенденцию продуцировать отрицательное радиационное влияние (т.е. способствует выхолаживанию);

– в локальном масштабе аэрозольное влияние бывает достаточно большим и даже настолько, что может пересилить положительный эффект (т.е. нагревание), обусловленный парниковыми газами.

Последний вывод имеет характер предупреждения о реальных возможностях получения экологически неблагоприятных и катастрофических ситуаций в индустриально нагруженных регионах, поскольку эффекты выхолаживания приводят к накоплению примесей в приземном слое атмосферы. Это повышает значимость совместных исследований переноса и трансформации примесей с изучением условий формирования мезоклиматов и учетом конкуренции городского острова тепла и парникового эффекта с «аэрозольным» выхолаживанием и стимулирует постановку специальных натурных экспериментов с целью обнаружения таких явлений. Практическое значение таких исследований состоит в выявлении предпосылок формирования экологических катастроф и их предупреждении.

Структура данных и моделей наблюдений

Функции состояния относятся к числу фундаментальных характеристик изучаемого объекта или процесса и соответствующих им математических моделей. Однако оценивание фактически наблюдаемого поведения системы с использованием только одних функций состояния зачастую оказывается неэффективным. Для исследований необходимо иметь возможность конструктивно реализовать прямые и обратные связи между результатами наблюдений и математической моделью процесса или с ее входными параметрами.

Результаты наблюдательных экспериментов можно описать с помощью функции распределения наблюдательных приборов в заданной пространственно-временной области и совокупности измеренных значений наблюдаемых величин. По содержанию и методам реализации измерения могут быть контактными, дистанционными и косвенными.

Прежде чем обсуждать общие проблемы взаимосвязей между наблюдениями и моделями процессов, надо сначала решить фундаментальный и в то же время конкретный практический вопрос: как выразить математически результаты наблюдений через значения функции состояния, которая участвует в математической модели для описания поведения изучаемых процессов или объектов. Другими словами, надо определить математические модели самих наблюдений. В общем случае это будет совокупность моделей, поскольку каждый тип наблюдений и каждый измерительный или наблюдательный прибор имеет свое алгоритмическое представление в терминах содержательного и количественного описания компонент функции состояния. Например, при контактных наблюдениях изменяются непосредственно значения функции состояния. Если отсутствуют ошибки измерений, то оператор модели наблюдений в таких случаях будет просто тождественным оператором. В дистанционных измерениях модель наблюдений обычно базируется на интегральных операторах, действующих в пространстве и времени на множестве значений функций состояния.

Пусть D_t обозначает область, в которой осуществляются наблюдаемые процессы и определена математическая модель, описывающая эти процессы. Предположим, что наблюдения реализуются на некотором множестве точек $D_t^m \subset D_t$, содержащем, по меньшей мере, одну точку. Поскольку в расчетах участвует численная модель на дискретной области $D_t^h \subset D_t$, то и множество точек D_t^m можно также считать дискретным:

$$\{(x, t)_\beta, \beta = \overline{1, r}, r \geq 1\} = D_t^m.$$

Совокупность наблюдаемых величин обозначим вектором Ψ^m , а рассчитанных с помощью моделей $[\Psi]^m$:

$$\Psi^m = \{\psi_{ab}^m \equiv [H_\alpha(\Phi)]_b^m + [\xi_\alpha(x, t)]_b^m\}; \quad (1)$$

$$\alpha = \overline{1, M}, M \geq 1, \beta = \overline{1, r}, r \geq 1,$$

где Φ – функция состояния; $H_\alpha(\Phi)$ – модель наблюдений; индекс α обозначает тип наблюдений; M – число измерительных приборов, различных по функциональному содержанию; $\xi_\alpha(x, t)$ – ошибки наблюдений, состоящие из ошибок наблюдательного прибора и самой модели. Верхний индекс m отмечает величины, относящиеся к описанию наблюдений. Символ $[\]_b^m$ обозначает операцию перевода информации из области D_t или D_t^h в точку $(x, t)_\beta$ множества D_t^m . Обычно это результат действия некоторого оператора интерполяции компонент функций с D_t^h на D_t^m , т.е.

$$[H_\alpha(\Phi)]_\beta = \hat{S} (H_\alpha(\Phi)) \Big|_{(x, t)_\beta}, \quad (2)$$

где \hat{S} – интерполяционный или проекционный оператор.

Каждый компонент ψ_{ab}^m вектора Ψ^m представляет собой индивидуальное значение измеренной величины в

точке $(x, t)_\beta$ по типу наблюдений с номером α в заданной шкале типов. Структуру вектора Ψ^m определим как блочную, в которой тип наблюдений определяет номер блока α , а сам блок составляют значения измерений этого типа во всех точках $(x, t)_\beta$ области D_t , где производятся измерения.

Аналогично (1) определим структуру векторов, рассчитанных с помощью модели

$$[\Psi]^m = \{[\Psi]_{\alpha\beta}^m \equiv [H_\alpha(\Phi)]_b^m\}. \quad (3)$$

Операторы моделей наблюдений выбираются так, чтобы они были ограниченными и дифференцируемыми относительно компонент вектор-функции состояния. Аналогичные свойства должны иметь и дискретные аналоги этих операторов и операторы \hat{S} в (2).

Модели процессов и функционалы наблюдений

Вернемся к вопросу о связях между наблюдениями и базовыми моделями процессов. Общая методология моделирования базируется на двух ключевых элементах [3–5].

1. Математическая модель процессов в вариационной формулировке

$$I(\Phi, \Phi^*, Y) = 0, \quad (4)$$

$$\Phi \in Q(D_t), \quad \Phi^* \in Q^*(D_t), \quad Y \in R(D_t).$$

2. Совокупность функционалов, определенных на множестве функций состояния

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

Здесь $I(\Phi, \Phi^*, Y)$ – интегральный функционал, который ставится в соответствие модели в дифференциальной формулировке; Φ – функция состояния; $Q(D_t)$ – пространство функций, удовлетворяющих краевым условиям; Φ^* – достаточно гладкие сопряженные функции из пространства $Q^*(D_t)$, сопряженного по отношению к $Q(D_t)$; Y – вектор входных параметров модели из множества допустимых значений $R(D_t)$; $F_k(\Phi)$ – заданные скалярные дифференцируемые функции на множестве функций состояния; $\chi_k(x, t) \geq 0$ – весовые функции, порождающие меры Радона или Дирака в области D_t [2]. Для моделирования эти меры удобны тем, что дают возможность единообразно учитывать в функционалах распределенные непрерывно и дискретно в области D_t поля значений функций как по отдельности, так и вместе.

Методика построения интегральных тождеств для моделей физики атмосферы и океана, переноса и трансформации примесей, а также способы алгоритмической организации прямых и обратных связей между функционалами вида (5) и моделями в форме (4) достаточно хорошо отработаны [3–6]. Поэтому для организации взаимодействия между наблюдениями и моделями достаточно информацию о наблюдениях (1), (2) для включения в систему моделирования представить с помощью функционалов вида (5).

Возникает вопрос: для чего это надо? Дело в том, что в терминах функционалов удобно комплексировать данные наблюдений различной природы, произвольно расположенные в области D_t . При работе с функционалами, опре-

деленными в D_i на множестве функций состояния, применяется мощный математический аппарат вариационных принципов и сопряженных задач. С их помощью каждое, даже одиночное, наблюдение связывается со всей совокупностью входных параметров и внешних воздействий, участвующих в численных моделях, при любом числе внутренних степеней свободы.

Рассмотрим выражение (4) с позиций теории измерений. Весовую функцию $\chi_k(\mathbf{x}, t)$ в нем можно интерпретировать как функцию размещения наблюдательных приборов в области D_i . Она определяет вклад значения функции $F_k(\boldsymbol{\varphi})$ в точке (\mathbf{x}, t) , представляющего показания размещенного в этой точке прибора, в значение функционала $\Phi_k(\boldsymbol{\varphi})$, т.е. суммарное значение измерений величины $F_k(\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}, t))$ в области D_i . Индекс k определяет номер типа измерений. В частности, если χ_k выбрать как дельта-функцию Дирака, то получим значение функционала, равное значению измеряемой функции в точке-носителе весовой функции.

Теперь, отталкиваясь от определений (1)–(3), (5), можно сформировать два типа функционалов.

1. Функционалы «наблюдений»:

$$\Phi_k(\boldsymbol{\varphi}) = \int_{D_i} H_\alpha(\boldsymbol{\varphi}) \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t) dD dt, \quad k = \overline{1, K}, \quad K = Mr, \quad \{k\} \equiv \{\alpha, \beta\}, \quad (6)$$

где $\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t)$ – заданные весовые функции. Если $\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t)$ равна дельта-функции Дирака с носителем в точке (\mathbf{x}, t) , то совокупность функционалов (6) представляет собой совокупность формул для оценок компонент вектора (1), (3). Для практических применений представляет интерес выбор мер Радона $\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t) dD dt$ как суммы мер Дирака, сосредоточенных на совокупности точек из множества D_i^m [2].

2. Функционалы «качества».

Функционалы этого типа имеют характер невязок между вычисленными с помощью модели (3) и полученными в реальных условиях (1) значениями компонент вектора наблюдений. Они выражают меру ошибок $\xi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ в (1) и используются в задачах усвоения данных измерений с помощью моделей процессов, диагностики качества моделей и идентификации их параметров и источников внешних воздействий по данным измерений.

Структуру функционалов качества определим формулами

$$\Phi_0^h(\boldsymbol{\varphi}) = [([\Psi]^m - \Psi^m)^T W_0([\Psi]^m - \Psi^m)]_{D_i^m}, \quad (7)$$

$$\Phi_0(\boldsymbol{\varphi}) = \sum_{\alpha=1}^M \int_{D_i} \{W_\alpha([\hat{S}H_\alpha(\boldsymbol{\varphi})]^m - \Psi_a^m) ([\hat{S}H_\alpha(\boldsymbol{\varphi})]^m - \Psi_a^m)\} \times \chi_\alpha(\mathbf{x}, t) dD dt, \quad (8)$$

где W_0, W_α – весовые матрицы; χ_α – весовые функции, $\chi_\alpha dD dt$ – меры Радона, которые выбираются так, чтобы учитывались все компоненты вектора Ψ^m ; индекс h отмечает дискретный аналог, а индекс T – операцию транспонирования. Скалярное произведение в (7) определяется на дискретном множестве D_i^m . При таком выборе мер функционалы в форме (7) и (8) по отношению к совокупности наблюдений эквивалентны.

Функционал вида (8) имеет более широкий спектр модификаций, чем (7), за счет выбора весовых матриц и функций, мер, а также операторов \hat{S} .

Когда требуются задачи усвоения данных и идентификации моделей объединять с задачей планирования наблюдательных экспериментов, с целью повышения их информативности, то для решения таких комплексных задач требуется одновременное использование и функционалов «индивидуальных» наблюдений типа (6), и функционалов качества (7), (8).

Соотношения теории чувствительности моделей и функционалов

Чтобы окончательно решить вопрос о включении функционалов в технологию моделирования, строятся алгоритмы расчета функций

$$\gamma_k^h(\boldsymbol{\varphi}) \equiv \frac{\partial \Phi_k^h(\boldsymbol{\varphi})}{\partial \boldsymbol{\varphi}}, \quad k = \overline{1, K}, \quad \boldsymbol{\varphi} \in Q^h(D_i^h). \quad (9)$$

Эти функции определяются в узлах сеточной области D_i^h и участвуют как источники в соответствующих сопряженных задачах для методов обратного моделирования и алгоритмов исследования чувствительности моделей и функционалов.

Если определен набор функционалов и для него построена совокупность сопряженных задач с источниками (9), то конструкция основных соотношений чувствительности для этих функционалов получается по алгоритму [3,4]:

$$\delta \Phi_k^h(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{Z}} I^h(\mathbf{j}, \mathbf{j}_k^*, \mathbf{Y} + \mathbf{z}d\mathbf{Y}) \Big|_{\zeta=0} \equiv R^h(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_k^*, \delta \mathbf{Y}), \quad k = \overline{1, K}, \quad (10)$$

где I^h – дискретный аналог функционала модели (4); $\boldsymbol{\varphi}$ и $\boldsymbol{\varphi}_k^*$ – решения основной и сопряженной задач, порождаемых функционалами I^h и $I^h + \Phi_k^h$ соответственно; символ δ обозначает вариации отмеченных им величин; ζ – вещественный параметр. Например, для модели гидротермодинамики атмосферы, объединенной с моделью переноса и трансформации примесей, принятой в качестве базовой для решения климато-экологических задач мониторинга и прогнозирования [5], соотношения (10) имеют вид:

$$\begin{aligned} \delta \Phi_k(\boldsymbol{\varphi}) &= \left(\frac{\partial I(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_k^*, \mathbf{Y})}{\partial \mathbf{Y}}, \delta \mathbf{Y} \right) \equiv R(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_k^*, \delta \mathbf{Y}) = \\ &= \int_{D_i} \{c_3 \delta Q_T T_k^* + c_4 \delta Q_q q_k^* + \sum_{\alpha=1}^n c_{\alpha+4} [\delta Q_{c\alpha} - \delta(B(C))]_{\alpha}\} dD dt + \\ &+ \int_D \sum_{i=1}^{4+n} c_i \delta \Psi_i \Phi_i^* \Big|_{t=0} m dD + R_1(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_k^*, \delta \mathbf{Y}) + R_2(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_k^*, \delta \mathbf{Y}) + \\ &+ R_3(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_k^*, \delta \mathbf{Y}), \end{aligned} \quad (11)$$

где R_1, R_2, R_3 имеют вид:

$$R_1(\boldsymbol{\varphi}, \boldsymbol{\varphi}_k^*, \delta \mathbf{Y}) \equiv \int_{\Omega_i} \left\{ \delta U_n \sum_{i=1}^{4+n} c_i \Psi_i \Phi_{ik}^* \frac{m^2}{\pi} + \right.$$

$$+ \left. \sum_{i=1}^{4+n} c_i U_n \delta \psi_{ik}^* \frac{m^2}{\pi} - \frac{\delta \pi}{\pi^2} \sum_{i=1}^{4+n} m^2 c_i U_n \psi_{ik}^* \right\} d\Omega dt, \quad (12)$$

$$R_2(\varphi, \varphi_k^*, \delta Y) \equiv \sum_{i=1}^{4+n} c_i \left\{ \int_{D_i} [\delta \mu_i \text{grad}_s \psi_i \text{grad}_s \varphi_{ik}^* + \frac{\delta v_i \partial \psi_i}{m} \frac{\partial \varphi_{ik}^*}{\partial \sigma}] m^2 dD dt + \int_{\Omega_i} \delta r_i \varphi_{ik}^* m d\Omega dt + \int_{S_i} \delta \tau_i \varphi_{ik}^* m dS dt \right\}, \quad (13)$$

$$R_3(\varphi, \varphi_k^*, \delta Y) \equiv \int_{\Omega_i} \{ G_k^* \delta U_n + U_{nk}^* \delta G + (U_{nk}^* - U_n T_k^*) \delta \pi - \pi T_k^* \delta U_n \} m d\Omega dt - \int_S T_k^* \delta (G_s \pi) + \pi_k^* \delta \pi |_{t=0} dS. \quad (14)$$

Здесь используются обозначения из [5,6]:

$$\varphi = \{ \varphi_i, (i = \overline{1, 4+n}) \equiv \{ u, v, T, q, C_\alpha (\alpha = \overline{1, n}) \}$$

– часть функций состояния базовой модели; $\psi = (\pi/m)\varphi$; звездочкой отмечены соответствующие им компоненты сопряженных функций; U_n – нормальная составляющая вектора скорости $U = (\pi/m)(u, v, \delta)$ к границе Ω_i области D_i ; S_i – проекция области D_i на поверхность Земли; u, v, δ – составляющие вектора скорости в направлении координат x, y, σ соответственно; T – температура; q – удельная влажность; C_α – концентрации загрязняющих примесей; n – число различных веществ; G – геопотенциал; π – функция от давления; m – масштабный множитель системы координат; $dD, d\Omega, dS$ – элементы объема и площадей; $c_i (i = \overline{1, 4+n})$ – весовые коэффициенты для выравнивания физических размерностей слагаемых в интегральном тождестве модели (4); μ_i, v_i – коэффициенты горизонтального и вертикального обмена для субстанции с номером i , а r_i, τ_i – значения турбулентных потоков на границах Ω_i и S_i . Символ δ в правых частях (11)–(14) обозначает вариации входных, по отношению к модели, величин: компонентов вектора состояния φ, ψ , ($\delta \psi_i = \pi \delta \varphi_i + \varphi_i \delta \pi$), $\delta \varphi_i = (m \delta \psi_i - \varphi_i \delta \pi) / \pi$, вектора параметров Y , источников тепла Q_T , влаги Q_q и примесей Q_C . Член $\delta(B(C))$ обозначает вариацию оператора трансформации примесей за счет вариаций констант скоростей реакций, включенных в оператор. Слагаемые, содержащие вариации притоков тепла δQ_T , зависят от вариаций концентраций оптически активных газов. Для их расчета рассматривается комплексная базовая модель гидротермодинамики с радиационным блоком совместно с моделью распространения примесей. При этом возникает новый тип сопряженных уравнений в составе модели переноса при-

месей. Новизна состоит в появлении слагаемых, учитывающих информацию о тенденциях влияния неоднородностей концентраций оптически активных газов на радиационные процессы. Кроме того, появляется новый элемент в составе базовых моделей – система уравнений, сопряженная по отношению к радиационному блоку. Формулы для расчета соответствующих дополнительных выражений к формулам (11)–(14) даны в [7].

Соотношения (11)–(14) показывают (на содержательном уровне) характер связей функционалов с параметрами и внешними источниками. Коэффициенты, стоящие в них при вариациях входных данных, суть функции чувствительности функционала $\Phi_k(\varphi)$ к этим вариациям соответственно.

Таким образом, полностью сформирован «внутренний» алгоритмический цикл по объединению моделей и данных наблюдений. С использованием функций чувствительности организация методов прямого и обратного моделирования реализуется в рамках общей методологии моделирования, описанной в [3,4].

Заключение

В статье изложены концептуальные и алгоритмические вопросы объединения экспериментальных и теоретических знаний, выраженных данными наблюдательных экспериментов и математическими моделями, для исследования атмосферных процессов совместно с процессами переноса и трансформации загрязняющих примесей. Примером такого объединения могут быть соотношения теории чувствительности для функционалов, содержащих данные измерений. Эти соотношения являются центральным звеном при формировании методов обратного моделирования, с помощью которых и реализуется связь от информации к модели. Возникающие в этих методах сопряженные задачи для функционалов рассматриваемого класса имеют и самостоятельное применение при исследовании масштабов и характера взаимодействий в климатической системе, функционирующей под влиянием естественных и антропогенных факторов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 97-05-96511 и 98-05-65318, и Программы интеграционных исследований СО РАН (ИГ СО РАН-97 № 30).

1. Пененко В.В., Кузин В.И., Панченко М.В. // Интеграционная программа фундаментальных исследований. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1998. С. 368–379.
2. Шварц Л. Анализ. Т. 1. М.: Мир, 1972. 824 с.
3. Пененко В.В. Методы моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоздат, 1981. 352 с.
4. Penenko V.V. // Bull. NCC. Num. Model. in Atmosph. 1996. N 4. P. 32–51.
5. Пененко В.В., Цветова Е.А. // Оптика атмосферы и океана. 1998. Т. 11. N 6. С. 586–593.
6. Пененко В.В., Цветова Е.А. // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12. N 5. С. 463–465.
7. Пененко В.В., Курбацкая Л.И. // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12. № 6 (в печати).

V.V. Penenko. Theoretical Grounding for Joint Use of Observational and Model Data for Investigation of Hydrothermodynamical Processes and Pollutants Transfer in the Atmosphere.

Methodology and algorithms for joint using of mathematical models and measurements of natural processes are discussed. The theoretical base of such constructions is variational principles and optimization methods applied to the combination of atmospheric hydrodynamics models with the models of transport and transformation of pollutants. The sensitivity relations and algorithms for their realization are constructed for this set. They allow the relative input of all acting factors into the variations of the investigated or observed characteristics of the processes and the tendency of their influence to be simultaneously evaluated.