«Оптика атмосферы и океана», **21**, № 6 (2008)

УДК 504.064, 519.6

В.В. Пененко

Прогнозирование изменений качества атмосферы с оценкой неопределенностей по данным мониторинга

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

Поступила в редакцию 11.02.2008 г.

Представлено развитие методики решения задач динамики атмосферы, океана и охраны окружающей среды. Новыми элементами являются численные алгоритмы получения оптимальных оценок прогнозируемых характеристик с учетом неопределенностей. Последние можно интерпретировать как ошибки моделей, параметров и входных данных. Функции неопределенностей явно вводятся в систему моделирования. Идея предлагаемого подхода базируется на специальной организации вариационного принципа для нелинейных моделей изучаемых процессов, которые рассматриваются в обобщенной вариационной формулировке. Для этого целевой функционал дополняется функционалами, выражающими суммарную меру всех неопределенностей и, при наличии данных наблюдений, меру отклонений между измеренными величинами и рассчитанными с помощью моделей образами этих величин. Описана структура вычислительной технологии, использующей универсальный алгоритм прямого-обратного моделирования для реализации методики. Предлагаемые алгоритмы предназначены для совершенствования организации адаптивных (или направленных) стратегий мониторинга и оптимального прогнозирования изменений качества атмосферы.

Введение

Проблема оценок неопределенности в математических моделях существует с момента возникновения самих моделей и постановок задач прогноза на их основе. Источниками неопределенностей, которые всегда присутствуют в моделях, являются несовершенство знаний о самих физических процессах, погрешности численных схем и алгоритмов их реализации и погрешности задания входных данных. Основным источником информации для решения проблемы прогноза и для оценок неопределенностей являются данные наблюдений. В свою очередь, привлечение данных мониторинга о наблюдаемом поведении изучаемых процессов добавляет другие неопределенности, связанные с погрешностью измерений и неточностью математической модели, используемой для вычисления образов наблюдаемых величин.

В последние годы активно развиваются различные подходы к оценке неопределенностей и предлагаются способы ослабления их влияния на качество прогнозирования. Существенную роль в этих подходах играют методы сопряженных уравнений, разработанные Г.И. Марчуком [1]. Применительно к моделям прогноза погоды наибольший прогресс достигнут в разработке методов улучшения начального состояния прогнозируемых полей и формирования прогностических ансамблей. Активизируются работы по методам теории чувствительности и усвоения данных для анализа ошибок прогноза и формирования адаптивных стратегий мониторинга. Описание основных подходов и обзор литературы по этим направлениям можно найти в работах [2–7].

В настоящей статье представлен новый этап в развиваемой нами методике моделирования [8–15]. Идея предлагаемого подхода базируется на специальной организации вариационных принципов для решения взаимосвязанных задач экологии и климата на базе нелинейных моделей динамики атмосферы, океана и охраны окружающей среды. Модели процессов рассматриваются в обобщенной вариационной формулировке, в которую явно и аддитивно вводятся функции неопределенностей. Целевой функционал дополняется функционалами, выражающими суммарную меру всех неопределенностей и, при наличии данных наблюдений, оценку отклонений между измеренными величинами и их образами, рассчитанными в терминах функций состояния. Далее формируется расширенный функционал и с помощью вариационного принципа конструируется универсальный алгоритм прямого-обратного моделирования, включающий алгоритмы расчета функций чувствительности и неопределенности соответствующих объектов.

При совместном использовании основных и сопряженных функций, функций неопределенности и чувствительности строятся оптимальные алгоритмы прогнозирования и планирования направленного адаптивного мониторинга эволюции природных процессов. Причем функции неопределенности вносят регуляризирующий эффект в алгоритмы. При решении задачи прогноза с усвоением данных наблюдений степень влияния неопределенностей уменьшается. При недостаточной освещенности области определения модели наблюдениями от фиксированной системы мониторинга или при отсутствии наблюдений вообще по функциям неопределенностей можно идентифицировать районы, где следует размещать станции адаптивной (подвижной) системы мониторинга.

Высокая эффективность смешанных стратегий мониторинга состава атмосферы с помощью фиксированных наблюдательных программ и подвижных средств мониторинга доказана на практике [16–20]. Подвижные средства более приспособлены для организации направленного мониторинга по заданным целевым критериям. Предлагаемые здесь алгоритмы предназначены для совершенствования организации таких смешанных стратегий.

Постановка задачи

Математическую модель пространственно-временной эволюции изучаемых процессов формально запишем в операторном виде

$$L(\varphi,\mathbf{Y}) \equiv \frac{\partial\varphi}{\partial t} + G(\varphi,\mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \mathbf{r} = 0; \qquad (1)$$

$$\varphi^0 = \varphi_a^0 + \xi \text{ при } t = 0;\ \mathbf{Y} = \mathbf{Y}_a + \zeta, \qquad (2)$$

где $\varphi \in Q(D_t)$ – вектор-функция состояния; $\mathbf{Y} \in R(D_t)$ – вектор параметров; $G(\varphi,\mathbf{Y})$ – «пространственный» оператор модели; $D_t = D \times [0,\bar{t}]$ – область изменения пространственных координат $\mathbf{x}$ и времени t. Индексом a отмечены априорные оценки. Обозначим через φ_m и Ψ_m набор измеренных данных на множестве $D_t^m \subset D_t$ и определим совокупность моделей наблюдений для формирования образов измеряемых величин в терминах функций состояния

$$\Psi_m = [H(\varphi)]_m + \eta. \qquad (3)$$

Здесь $[\,]_m$ обозначает оператор переноса информации с сетки $D_t^h \subset D_t$ на множество D_t^m. Функции $\mathbf{r}$, ξ, ζ, η описывают неопределенности и ошибки соответствующих объектов. При построении алгоритмов в состав 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. Будем работать с функционалами общего вида

$$\Phi_k(\varphi,\mathbf{Y}) = \int_{D_t} F_k(\varphi,\mathbf{Y})\chi_k(\mathbf{x},t)\,dDdt = (F_k,\chi_k),$$
$$k = \overline{1,K},\ K \geq 1, \qquad (4)$$

где $F_k(\varphi,\mathbf{Y})$ – оцениваемые и $\chi_k \geq 0$ – весовые функции. Выбор всех объектов в (4) определяется в зависимости от целей исследований. Функции $F_k(\varphi,\mathbf{Y}) \in Q(D_t)$ будем выбирать ограниченными, непрерывными по Липшицу и дифференцируемыми по Гато относительно своих функциональных аргументов $(\varphi,\mathbf{Y}) \in \{Q(D_t) \times R(D_t)\}$. Структуру весовых функций определим, исходя из следующих соображений.

1. Выберем в (4) $\chi_k(\mathbf{x},t) \in Q^*(D_t)$, где $Q^*(D_t)$ – пространство функций, сопряженное к $Q(D_t)$. Эти функции определяют меры Радона или Дирака $\chi_k(\mathbf{x},t)dDdt$ в D_t. Свойства таких мер детально обсуждены в [21]. Для определенности потребуем, чтобы выполнялись условия нормировки

$$\int_{D_t} \chi_k(\mathbf{x},t)dDdt = 1,\ \chi_k \geq 0. \qquad (5)$$

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

3. Диапазон значений χ_k зададим так, чтобы ранжировать область D_t^v по степени вклада функции F_k в суммарное значение функционала Φ_k.

Неопределенности в моделях и данных как основа для их объединения

Для решения задач используем вариационный принцип. Определим расширенный функционал

$$\tilde{\Phi}_k^h(\varphi) = \left[I^h(\varphi,\mathbf{Y},\varphi_k^*)\right]_{D_t^h} +$$
$$+\left\{\alpha_0\Phi_k^h(\varphi,\mathbf{Y}) + 0{,}5\alpha_1(\eta^T W_1\eta)_{D_t^m}\right\}^h +$$
$$+0{,}5\left\{\alpha_2(\mathbf{r}^T W_2\mathbf{r})_{D_t^h} + \alpha_3(\xi^T W_3\xi)_{D^h} + \alpha_4(\zeta^T W_4\zeta)_{R^h(D_t^h)}\right\}^h \geq 0. \qquad (6)$$

Здесь Φ_k – целевой функционал вида (4), а функционал

$$I(\varphi,\mathbf{Y},\varphi_k^*) \equiv \left(L(\varphi,\mathbf{Y}),\varphi_k^*\right) = 0 \qquad (7)$$

представляет интегральное тождество для описания модели в вариационной формулировке; $\alpha_i \geq 0$, $i = \overline{0,4}$ – весовые коэффициенты. Верхний индекс h здесь и далее обозначает дискретные аналоги соответствующих объектов. Последние четыре функционала в (6) определим с помощью скалярных произведений энергетического типа. Структура всех функционалов в (6) описывается формулой (4). Их индивидуальность выражается конкретным заданием оцениваемых и весовых функций. Функционал интегрального тождества (7) выберем так, чтобы при $\varphi^* = \varphi$ из (7) получалось уравнение баланса полной энергии системы (1). В наблюдательной части функционала, содержащей функцию η из (3), учитываются все доступные данные наблюдений φ_m и ψ_m.

Весовые матрицы W_i в функционалах (6) определим следующим образом:

$$W_i = \tilde{W}_i \chi_{W_i}, \; i = \overline{1,4}, \tag{8}$$

где $\tilde{W}_i$ — диагональные матрицы, задающие энергетическую метрику по физическому содержанию соответствующих функций; χ_{W_i} — диагональные матрицы, элементы которых выражают меры Радона и Дирака. Они имеют такой же смысл, как и меры в определении функционалов (4). При таком способе задания весовых функций и мер все функционалы для дискретных и распределенных характеристик строятся по единому правилу. Это важно при построении и реализации адаптивных алгоритмов, которые должны работать в режиме слежения за пространственно-временной динамикой носителей различных информационных полей.

Универсальный алгоритм прямого-обратного моделирования

Следуя [11, 12], построим схему универсального алгоритма прямого-обратного моделирования с количественной оценкой функций неопределенностей. Не вдаваясь в описание всех деталей вычислительной технологии, представим только ее основные элементы, реализующие условия стационарности расширенного функционала (6) по отношению к вариациям его функциональных аргументов $\partial\tilde{\Phi}^h / \partial s = 0$ $(s = \varphi, \varphi^*, r, \xi, \zeta)$. В результате преобразований получим

1) систему основных уравнений:

$$\left\{ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + G(\varphi, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \mathbf{r} \right\}^h = 0; \tag{9}$$

2) систему сопряженных уравнений:

$$\left\{ -\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} + A^*(\varphi, \mathbf{Y})\varphi^* + \alpha_0 \frac{\partial \Phi_k}{\partial \varphi} + \alpha_1 \left(\frac{\partial H}{\partial \varphi} \right)^* W_1 \big(\boldsymbol{\Psi} - H(\varphi) \big) \right\}^h = 0; \tag{10}$$

$$\varphi^*(\mathbf{x}, \bar{t}) = 0; \tag{11}$$

3) систему уравнений для оценок неопределенностей:

$$\alpha_2 W_2 \mathbf{r} - \varphi^*(\mathbf{x}, t) = 0, \tag{12}$$

$$\alpha_3 W_3 \xi - \varphi^*(\mathbf{x}, 0) = 0, \tag{13}$$

$$\alpha_4 W_4 \zeta + \alpha_0 \frac{\partial \Phi_k^h}{\partial \mathbf{Y}} + \frac{\partial I^h}{\partial \mathbf{Y}} = 0. \tag{14}$$

В уравнении (10) A^* — оператор, сопряженный по отношению к линеаризованному по Гато оператору модели (1) в дискретном представлении (9). Верхний индекс «*» отмечает сопряженные (транспонированные) операторы и функции из сопряженного пространства. В уравнении (14) учитываются только те составляющие функций чувствительности, которые соответствуют параметрам с явным учетом неопределенностей в составе функционалов $\tilde{\Phi}_k^h$ и I^h. После решения задач (9)–(14) получим соотношение чувствительности

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

$$\equiv \left(\frac{\partial \Phi_k^h}{\partial \mathbf{Y}}, \delta\mathbf{Y} \right), \tag{15}$$

где a — вещественный параметр; φ_k^* — решение задачи (10) с функционалом Φ_k. В отличие от (14) в соотношении чувствительности (15) учтены все слагаемые с вариациями всех характеристик, отнесенных к категории параметров модели.

Уравнения обратной связи

На практике целевые функционалы (4) удобно выбирать в виде суммы пар слагаемых:

$$\Phi_k(\varphi, \mathbf{Y}) = \Phi_{ks}(\varphi) + \Phi_{kp}(\mathbf{Y}). \tag{16}$$

Конкретно параметрическую часть функционала можно взять в виде

$$\Phi_{kp}(\mathbf{Y}) = 0{,}5 \int\limits_{D_t} \left\{ \sum_{i=1}^{N} \left(\gamma_1 \Gamma_{ip}^{(1)} \left| \operatorname{grad}\left(Y_i - \tilde{Y}_i \right) \right|^2 + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \gamma_2 \Gamma_{ip}^{(2)} \left(Y_i - \tilde{Y}_i \right)^2 \right) \right\} dDdt. \tag{17}$$

Здесь $\tilde{Y}_i$ — значения параметров, вычисленные по схемам физической параметризации моделей (например, коэффициенты турбулентности по схеме Смагоринского); γ_1, $\gamma_2 \geq 0$ — весовые множители; $\Gamma_{ip}^{(\alpha)}$ — положительные диагональные матрицы масштабирующих коэффициентов и весов, построенные по образцу матриц (8); N — общее число параметров.

Следуя [10], построим систему уравнений обратной связи для уточнения параметров, исходя из условий минимизации целевого функционала и соотношений чувствительности (15):

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = -\kappa \Gamma_i^{-1} \frac{\partial \Phi_k(\varphi, \mathbf{Y})}{\partial Y_i}, \quad i = \overline{1, N};$$

$$\kappa \cong \Phi_k(\varphi, \mathbf{Y}) \Big/ \left(\frac{\partial \Phi_k}{\partial \mathbf{Y}}, \frac{\partial \Phi_k}{\partial \mathbf{Y}} \right), \tag{18}$$

κ — итерационный параметр; Γ_i — матрица формирования метрики в пространстве параметров. При выборе целевых функционалов в виде (16), (17) уравнения обратной связи имеют следующую структуру:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = -\kappa \Gamma_i^{-1} \left\{ \frac{\partial I^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi^*)}{\partial Y_i} - \right.$$

$$\left. - \gamma_1 \operatorname{div} \Gamma_{ip}^{(1)} \operatorname{grad}\left(Y_i - \tilde{Y}_i \right) + \gamma_2 \Gamma_{ip}^{(2)} \left(Y_i - \tilde{Y}_i \right) \right\}. \tag{19}$$

Все численные схемы для формирования задач (9)–(19) порождены вариационным принципом для оценок функционала (6). Способ их построения гарантирует взаимную согласованность всех элементов алгоритма. В общем случае комплекс задач (9)–(19) решается итерационными методами. Функционалы, входящие в состав (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 «окна» усвоения данных взять равными интервалам дискретизации моделей по времени, то в этом случае получаются прямые алгоритмы решения задач (9)–(19) в режиме реального времени. Некоторые модификации таких алгоритмов описаны в [13].

Алгоритмы диагностики качества модели и локализации подвижных станций мониторинга

1. Адаптивная стратегия мониторинга для уменьшения неопределенности прогноза

Сначала рассмотрим случай, когда в интервале $[0,\bar{t}\,]$ отсутствуют данные фиксированной системы наблюдений $\{\psi_m\}$. Определим в области оценивания D_t^v прогностический функционал типа (4). Конкретно, положим в (6) $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = 0$ и возьмем функцию F_k в виде

$$F_k(\varphi,\mathbf{Y}) = 0{,}5\big((\varphi-\varphi_a)W_k(\varphi-\varphi_a)\big) \qquad (20)$$

и $\chi_k(\mathbf{x},t)>0$ при $(\mathbf{x},t)\in D_t^v$, где $\varphi_a(\mathbf{x},t)$ – заданная априорная оценка искомой функции состояния в D_t^v; W_k – весовая диагональная матрица. Ее элементы определяют масштабные множители в записи формулы (20), которая описывает энергию возмущений функции состояния в D_t^v.

Выполним один цикл вычислений по схеме (9)–(15) с априорно заданными значениями входных данных:

$$\left\{\varphi_a,\varphi_a^0(\mathbf{x});\ \mathbf{Y}_a,\mathbf{f}_a,\mathbf{r}_a=0,\zeta_a=0,\xi_a=0\right\}.$$

В качестве выходной информации получаем совокупность значений функций

$$\left\{\varphi(\mathbf{x},t),\ \varphi^*(\mathbf{x},t),\ \mathbf{r}(\mathbf{x},t),\ \xi(\mathbf{x},t),\ \zeta(\mathbf{x},t)\right\}$$

и полный набор функций чувствительности $\{\partial\Phi_k^h/\partial\mathbf{Y}\}_i$, $i=\overline{1,N}$, входящих в соотношение чувствительности (15).

Все эти функции определяются исходя из требований оптимальности оценки прогностического функционала (4), (20). Оптимальность понимается в том смысле, что величина вариации оцениваемого функционала не зависит от вариаций $\delta\varphi(\mathbf{x},t)$ функции φ в области D_t^v. Численная схема для нахождения функции $\varphi(\mathbf{x},\,t)$ строится из условий, чтобы значения вариаций $\delta\tilde{\Phi}_k^h$ и $\delta I^h(\varphi,\mathbf{Y},\varphi^*)$ функционалов (6) и (7) не зависели от вариаций $\delta\varphi^*$ функций $\varphi^*(\mathbf{x},t)$ и от вариаций функций неопределенностей. Из уравнений (9) и (12) следует, что функции неопределенности модели $\mathbf{r}$ с точностью до весовых матриц и коэффициентов определяются через решение сопряженных задач, порождаемых вариационным принципом для расширенного функционала. При этом неважно, имеются данные наблюдений или нет. В общем случае достаточно только наличия прогнозируемого функционала Φ_k. Решение сопряженной задачи $\varphi_k^*(\mathbf{x},t)$ участвует также при расчете функций чувствительности Φ_k к вариациям $\delta\mathbf{Y}$ параметров $\mathbf{Y}$ в алгоритмах (15), (17) и (18). Напомним, что при построении алгоритмов в состав параметров мы включаем источники $\mathbf{f}(\mathbf{x},\,t)$, начальные условия и неоднородности краевых условий.

Как функции неопределенности, так и функции чувствительности рассчитываются через одни и те же функции φ_k^*, построенные для различных Φ_k, $k=\overline{1,K}$. Тем не менее их целевое назначение может иметь свои особенности. В частности, применение функций чувствительности главным образом направлено на исследование тенденций в поведении функционалов в пространстве параметров. Это требуется для идентификации параметров, источников, начальных и краевых условий и т.д. Функции неопределенностей выражают ошибки при условиях оптимальности прогнозируемых характеристик и используются для анализа системы в целом и для организации адаптивных стратегий мониторинга. Например, если ставится задача организовать адаптивную схему размещения мобильных средств мониторинга для уменьшения неопределенностей прогноза, то для этих целей наиболее подходящими могут быть области с повышенными значениями функций неопределенности и чувствительности. Это обусловлено тем, что все функции получаются из условий оптимальности оценок обобщенных характеристик прогноза.

2. Размещение подвижных средств мониторинга в дополнение к фиксированной программе наблюдений

Рассмотрим ситуацию, когда в интервале $[0,\bar{t}\,]$ поступают данные с некоторой совокупности стационарных станций мониторинга, расположенных в D_t^m, и требуется решить задачу об адаптивном размещении дополнительных подвижных средств наблюдений.

Задачи такого типа удобно решать в два этапа. На первом этапе формируется расширенный функционал (6), в третьем слагаемом которого учитываются все доступные данные наблюдений с весом $\alpha_1 = 1$, а целевой функционал Φ_k исключается ($\alpha_0 = 0$). При таких исходных предпосылках решается задача прогноза-усвоения по схеме (9)–(20). Рассчитываются все функции чувствительности и неопределенности, как и в п. 1. По конфигурации и диапазонам значений функций чувствительности идентифицируются области в D_t с заданным уровнем наблюдаемости со станций мониторинга. Обозначим их как $D_t^H \in D_t$. В таких областях с помощью процедуры усвоения данных можно восстановить необходимую для прогноза пространственно-временную структуру переменных состояния и параметров, обеспечивающих минимальное значение «наблюдательного» функционала качества. Отсюда следует, что дополнительные наблюдения целесообразно размещать в области $D_t^A = D_t^h / D_t^H$, т.е. вне области наблюдаемости D_t^H.

Теперь можно переходить к следующему этапу. Здесь решается задача прогноза-усвоения данных с функционалами качества (6) при $\alpha_0 = 1$ и $\alpha_1 = 1$ по схеме (9)–(19), как и в п. 1. В результате определяются фазовые пространства значений функций состояния, функций чувствительности и функций неопределенности в области D_t^h. Идентифицированная на первом этапе область наблюдаемости D_t^H имеет гарантированную степень «освещенности» данными наблюдений от фиксированных станций. Следовательно, для адаптивного размещения подвижных наблюдений следует использовать критерий выбора локализации измерений в подобластях повышенных значений функций неопределенности и чувствительности в $D_t^A \subset D_t^h$. Идея алгоритма адаптивной организации наблюдений, исходя из условий минимизации функций неопределенностей в областях, не наблюдаемых с помощью фиксированных систем мониторинга, принадлежит А.В. Пененко (персональное сообщение).

3. Функции чувствительности и неопределенности в системе моделирования

Они играют ключевую роль в организации прямых и обратных связей между параметрами системы и целевыми функционалами. Это видно из системы уравнений (9)–(19) применительно к задачам прогноза и усвоения данных наблюдений.

В ставших уже традиционными вариационных методах усвоения данных, в различных модификациях реализуется схема, впервые предложенная в [9]. В ней 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 введение в структуру моделей и параметров функций неопределенностей коренным образом меняет дело. Через функцию неопределенности $\mathbf{r}$ в режим обратной связи непосредственно включается все 4-мерное фазовое пространство значений функции $\varphi^*(\mathbf{x}, t)$, а через функцию неопределенности параметров ζ – все функции чувствительности целевого функционала к вариациям параметров.

Введение функций неопределенности вносит новое качество в систему моделирования в целом. Речь идет о регуляризации вычислительных алгоритмов. Чтобы продемонстрировать идею доказательства этого факта, рассмотрим случай, когда операторы моделей процессов и моделей наблюдений линейны относительно функций состояния: $G(\varphi, \mathbf{Y}) = A(\mathbf{Y})\varphi$, $H(\varphi) = H\varphi$. Такая ситуация, например, имеет место, когда в модели переноса и трансформации многокомпонентных примесей участвует линейный (линеаризованный) оператор трансформации. При этих предположениях система уравнений (9)–(15) примет вид:

$$\Lambda\varphi - \mathbf{f} - \mathbf{r} = 0; \quad \Lambda\varphi \equiv \left[\frac{\partial\varphi}{\partial t} + A(\mathbf{Y})\varphi\right]^h, \qquad (21)$$

$$\Lambda^*\varphi^* + \alpha_0 W_0(\varphi - \varphi_a) + \alpha_1 H^T W_1(\Psi - H\varphi) = 0, \quad (22)$$

$$\mathbf{r} = \alpha_2^{-1} W_2^{-1} \varphi^*. \qquad (23)$$

Исключая, формально, из этих уравнений функции φ^* и $\mathbf{r}$, после преобразований получим систему уравнений:

$$\Lambda^* W_2 \Lambda\varphi + \alpha_2^{-1}\left[\alpha_0 W_0 + \alpha_1 H^T W_2 H\right]\varphi =$$
$$= \Lambda^* W_2 \mathbf{f} + \alpha_2^{-1}\left[\alpha_0 W_0 \varphi_a + \alpha_1 H^T W_2 \Psi\right]. \qquad (24)$$

Так как $\alpha_i \ge 0$ и W_i – диагональные весовые матрицы с положительными элементами, системы (21)–(23) и (24) являются хорошо обусловленными. Из (24) видно, что при $\alpha_0, \alpha_1 > 0$ включение количественного аппарата оценок неопределенностей вносит эффект регуляризации и, как следствие, улучшает свойства сходимости итерационных алгоритмов при решении обратных и оптимизационных задач. Подчеркнем, что согласно схеме алгоритма решается система (21)–(23), а система (24) выписана только для анализа поведения алгоритма в целом.

Заключение

Разработана новая методика прогнозирования динамики и качества атмосферы, в которой, наряду с искомыми функциями состояния, рассчитываются функции неопределенности. Последние можно интерпретировать как ошибки моделей, параметров и входных данных. Эти функции вводятся в систему моделирования явно, как дополнительные слагаемые в представлении соответствующих объектов. Предложенные алгоритмы предназначены для совершенствования организации адаптивных стратегий мониторинга, для оптимального прогнозирования изменений качества атмосферы.

Работа поддержана программами № 16 Президиума РАН и № 3 ОМН РАН, проектом РФФИ № 07-05-00673 и контрактом Европейской Комиссии № 013427.

1. *Марчук Г.И.* Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992. 335 с.
2. *Buizza R., Montani A.* Targeting observations using singular vectors // J. Atmos. 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. Atmos. 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. Atmos. 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. Atmos. 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. Atmos. Sci. 2004. V. 61. N 7. P. 795–812.
7. *Toth Z., Kalnay E.* Ensemble forecasting at NMC: the generation of perturbations // Bull. Amer. Meteorol. Soc. 1993. V. 74. N 12. P. 2317–2330.
8. *Пененко В.В.* Вычислительные аспекты моделирования динамики атмосферных процессов и оценки влияния различных факторов на динамику атмосферы // Некоторые проблемы вычислительной и прикладной математики. Новосибирск: Наука, 1975. С. 61–77.
9. *Пененко В.В., Образцов Н.Н.* Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорол. и гидрол. 1976. № 11. С. 1–11.
10. *Пененко В.В.* Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 352 с.
11. *Пененко В.В.* Системная организация математических моделей для задач физики атмосферы, океана и охраны окружающей среды. Препр. / ВЦ СО АН СССР (Новосибирск). 1985. № 619. С. 44.
12. *Penenko V.* Some aspects of mathematical modeling using the models together with observational data // Bull. Novosib. Comput. Cent. Ser. Numer. Model Atmos., etc. 1996. V. 4. P. 31–52.
13. *Пененко В.В.* Вариационное усвоение данных в реальном времени // Вычислит. технол. 2005. Т. 10. № 8. С. 9–20.
14. *Penenko V.V., Tsvetova E.A.* Variational technique for environmental risk/vulnerability assessment and control // Air, Water and Soil Quality Modelling for Risk and Impact Assessment / Ebel A. and Davitashvily T. (eds.). Dordrecht, Netherlands: Springer, 2007. P. 15–28.
15. *Пененко В.В., Цветова Е.А.* Математические модели природоохранного прогнозирования // Прикл. мех. и техн. физ. 2007. Т. 48. № 3. С. 152–163.
16. *Крутцен П.Й., Голицын Г.С., Еланский Н.Ф., Бреннинкмейр К.А.М., Шарффе Д., Беликов И.Б., Елохов А.С.* Наблюдения малых примесей в атмосфере над территорией России с использованием железнодорожного вагона-лаборатории // Докл. РАН. 1996. Т. 350. № 6. С. 819–823.
17. *Белан Б.Д., Зуев В.Е., Панченко М.В.* Основные результаты самолетного зондирования аэрозоля в ИОА СО РАН (1981–1991 гг.) // Оптика атмосф. и океана. 1995. Т. 8. № 1–2. С. 131–156.
18. *Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Давыдов Д.К., Ивлев Г.А., Козлов А.В., Пестунов Д.А., Покровский Е.В., Симоненков Д.В., Ужегова Н.В., Фофонов А.В.* Мобильная станция АКВ-2 и ее применение на примере г. Томска // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 18. № 8. С. 643–648.
19. *Сакерин С.М., Кабанов Д.М., Панченко М.В., Полькин В.В., Холбен Б.Н., Смирнов А.В., Береснев С.А., Горда С.Ю., Корниенко Г.И., Николашкин С.В., Поддубный В.А., Тащилин М.А.* Результаты мониторинга атмосферного аэрозоля в азиатской части России по программе AEROSIBNET в 2004 г. // Оптика атмосф. и океана. 2005. Т. 18. № 11. С. 968–975.
20. *Белан Б.Д., Ивлев Г.А., Козлов А.С., Маринайте И.И., Пененко В.В., Покровский Е.В., Симоненков Д.В., Фофонов А.В., Ходжер Т.В.* Сравнительная оценка состава воздуха промышленных городов Сибири // Оптика атмосф. и океана. 2007. Т. 20. № 5. С. 428–437.
21. *Шварц Л.* Анализ. М.: Мир, 1972. 824 с.

V.V. Penenko. **Forecasting the atmospheric quality changes with uncertainty assessment by monitoring data.**

A further development of the methodology for solving to the problems of the atmosphere and ocean dynamics and environmental protection is presented. The new elements are the numerical algorithms for optimal estimations of the prognostic characteristics with allowance for uncertainties which are interpreted as errors of models, parameters, and input data. The uncertainties are explicitly introduced into the modeling system. The idea of the proposed approach is based on the specific organization of variational principle for nonlinear models of the processes. The models are considered in the generalized form. The objective functional is supplemented by the functionals of the total measure of uncertainty and, if any, the functionals of the measure of deviations of the calculated values from the data of measurements.

The structure of computing technique is described. The universal algorithm of direct-backward modeling is used. The proposed algorithms have been designed to improve adaptive (or targeted) monitoring strategies and optimal forecast of atmospheric quality changes.