



# Вариационные методы обеспечения направленного мониторинга качества атмосферы по заданным целевым критериям



Пененко В.В.



# Действующие и перспективные системы наблюдений

- **Наземные (in situ) наблюдения**

Каждые 6 час на высотах 1,5-2 м: температура, давление, ветер, относительная влажность ; более 80 000 наблюдений каждый день

- **Наземные сети дистанционного зондирования**

Более 10 типов различных систем наблюдений

- **Наблюдения верхней атмосферы (in situ):**

температура, состав газов, аэрозолей, облачные компоненты

- **Спутниковые системы дистанционных наблюдений**

Каждый день получают более чем 1 000 000 наблюдений атмосферы и поверхности Земли

**! Только около 20% большинства спутниковых данных усваивается в численных моделях**

По данным обзора WMO-No 1156



© ФГУП «ГНПРЦ» «ЦСКБ-Прогресс», 2011

## Прямые и обратные задачи


- Локальные, региональные и глобальные проблемы загрязнения атмосферы
- Природоохранные задачи при нормальных и аварийных ситуациях
- Идентификация источников антропогенных воздействий
- Выявление предпосылок и прогнозирование последствий экологических катастроф
- Оценка экологического риска и уязвимости
- Подготовка решений для экологической экспертизы
- Оценка эффективности природоохранных стратегий

## Компоненты модели

- Гидротермодинамика атмосферы и водных объектов
- Перенос и трансформация
  - газов
  - аэрозолей
- Турбулентность
- Перенос излучения

## Методы

- Вариационные принципы для совместного использования моделей и данных наблюдений
- Методы усвоения данных наблюдений
- Методы расщепления и декомпозиции
- Конечные элементы и объемы
- Дискретно-аналитические аппроксимации
- Сопряженные интегрирующие множители для дифференциальных и интегральных уравнений
- Монотонные схемы
- Параллельные вычисления



Много-  
функциональный  
комплекс



# Общий случай систем моделирования, включая нелинейные задачи



$$L(\varphi, \mathbf{U}, \mathbf{Y}, \mathbf{f}, \mathbf{r}) \equiv \frac{\partial \varphi}{\partial t} + G(\varphi, \mathbf{U}, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \mathbf{r} = 0$$
$$\varphi^0 = \varphi_a^0 + \xi, \quad t = 0$$

Вектор функциональных аргументов системы  
моделирования

$$\mathbf{X} = \{\varphi, \mathbf{U}, \mathbf{Y}, \mathbf{f}, \mathbf{r}, \xi\}$$

Результаты и модели наблюдений

$$\Psi_m = \tilde{H}_m(\varphi) + \eta_m, \quad m = \overline{1, M}$$

Целевые функционалы исследований

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

# Модели дистанционных наблюдений для расчета образов измеряемых величин

Расчет спектральной интенсивности,  
измеряемой со спутника

$$W_1 : J_\nu = B_\nu(T(t))P_\nu(1,0,0) + \\ + \int_0^1 B_\nu(T(\sigma)) \frac{\partial P_\nu(0,\sigma,0)}{\partial \sigma} d\sigma + \eta_1(\nu)$$

$B_\nu(T)$ - функция Планка

Расчет яркостных температур

$$W_2 : T_{bv} = \int_0^H T(l)\beta_\nu(l) \exp\left\{-\int_0^l \gamma_\nu(l')dl'\right\} dl + \eta_2(\nu) = 0$$

# Модели дистанционных наблюдений для расчета образов измеряемых величин

## Расчет сигнала лазерного зондирования

$$W_3 : S(r) = Cb(r)\alpha(r) \exp \left\{ -2 \int_0^r \alpha(r') dr' \right\} + \eta_3(\mathbf{v})$$

$\alpha(r)$  коэффициент аэрозольного ослабления

## Модель фотометрирования солнечного излучения (Аэронет)

$$W_4 : J_{\mathbf{v}} = J_{\mathbf{v}0} P(\mathbf{v}, \varphi) \exp(-\tau(\mathbf{v}, \varphi)) + \eta_4(\mathbf{v})$$

$P(\mathbf{v}, \varphi)$  функция пропускания

$\tau(\mathbf{v}, \varphi)$  интегральный оператор “оптической толщии”

$J_{\mathbf{v}}(\mathbf{v}, \varphi)$  образ регистрируемого значения сигнала

## Результаты и модели наблюдений

$$\Psi_m = \tilde{H}_m(\varphi) + \eta_m, \quad m = \overline{1, M}$$

$$H_m(\varphi): \{\varphi\} \Rightarrow \{\Psi_m\}$$

$$\left(\partial H_m / \partial \varphi\right)^T : \{\Psi_m\} \Rightarrow \{\varphi\}$$

## Функционалы наблюдений

$$\Phi_1(\varphi) = \int_{D_t} \left( \Psi_m - [\tilde{H}(\varphi)]_m \right)^T M_1 \left( \Psi_m - [\tilde{H}(\varphi)]_m \right) \chi_1(x, t) dDdt$$

# Совместное усвоение данных контактных и дистанционных наблюдений

Модели дистанционных наблюдений обычно описываются операторами интегрального типа, которые аппроксимируются «прямоугольными» матрицами.

Задачи их обращения некорректны!

В вариационном принципе участвуют одновременно модели процессов и модели дистанционных и контактных наблюдений.

Постановки задач для моделей процессов корректны.

Алгоритмы реализации моделей процессов обеспечивают свойства

- монотонности и транспортности
- хорошей обусловленности.

Поэтому в целом вариационные формулировки задач усвоения и алгоритмы их реализации корректны

Открытый вопрос: скорость сходимости итерационных процессов





# Вариационный принцип для объединения всех объектов системы моделирования

Интегральное тождество

$$I(\mathbf{X}, \boldsymbol{\varphi}^*) = (L(\mathbf{X}), \boldsymbol{\varphi}^*) = \int_{D_t} \left( \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial t} + G(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{U}, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \mathbf{r}, \boldsymbol{\varphi}^* \right) dDdt = 0$$

$I(\mathbf{X}, \boldsymbol{\varphi}) = 0$       уравнение баланса энергии для системы

$\boldsymbol{\varphi}^* \in Q^*(D_t)$       вектор сопряженных функций



# Сопряженные функции

## 1. «Глобальные»:

Распределённые множители Лагранжа для объединения моделей процессов, данных наблюдений и целевых функционалов прогнозирования в рамках вариационного принципа;

## 2. В глобальном масштабе и в режиме декомпозиции в сочетании с методами конечных элементов/объемов:

Решения однородных сопряженных задач для построения численных схем, обладающих законами сохранения (сопряженные интегрирующие множители)



# Расширенный функционал вариационного принципа со слабыми ограничениями

$$(\mathbf{r} \neq 0)$$

$$\Phi^h(\mathbf{X}, \varphi^*, \boldsymbol{\eta}) = \Phi_k^h(\varphi) + \left[ I^h(\mathbf{X}, \varphi^*) \right]_{D_t^h} +$$

$$0,5\alpha_1 (W_1 \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta})_{D_t^m}^h + 0.5 \left\{ \alpha_2 (W_2 \mathbf{r}, \mathbf{r})_{D_t^h} + \alpha_3 (W_3 \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi})_{D^h} \right\}^h$$

Это основа «бесшовных» технологий математического моделирования



# Декомпозиция и расщепление для построения численных схем и алгоритмов со свойствами суммарной аппроксимации

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^q \left( \gamma_{\alpha} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right); \quad G(\Phi, \mathbf{U}, \mathbf{Y}) = \sum_{\alpha=1}^q \Lambda_{\alpha} \Phi;$$

$$\mathbf{f} = \sum_{\alpha=1}^q \mathbf{f}_{\alpha}; \quad \mathbf{r} = \sum_{\alpha=1}^q \mathbf{r}_{\alpha}; \quad \sum_{\alpha=1}^q \gamma_{\alpha} = 1; \quad t_j \leq t \leq t_{j+1}$$

$$\gamma_{\alpha} \frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial t} + \Lambda_{\alpha} \Phi_{\alpha} + \mathbf{f}_{\alpha} + \mathbf{r}_{\alpha} = 0; \quad \alpha = \overline{1, q}$$

$$\Phi_{\alpha}^j = \Phi^j; \quad \Phi^{j+1} = \sum_{\alpha=1}^q \left( \gamma_{\alpha} \Phi_{\alpha}^{j+1} \right); \quad \mathbf{r}^{j+1} = \sum_{\alpha=1}^q \left( \gamma_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha}^{j+1} \right)$$



# Технология моделирования на основе вариационных принципов:



**Пять фундаментальных пространств для решения задач природоохранного прогнозирования и проектирования**

- **Функции состояния прямой задачи**
- **Решения сопряженных задач**
- **Функции неопределенностей моделей процессов**
- **Функции чувствительности моделей процессов и целевых функционалов к вариациям параметров моделей, начальных данных, функций краевых условий и источников воздействий**
- **Функции чувствительности целевых функционалов к вариациям данных наблюдений**

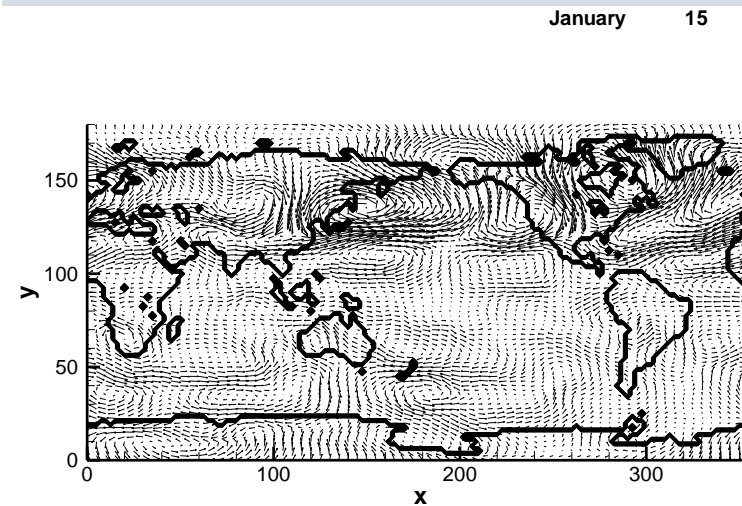
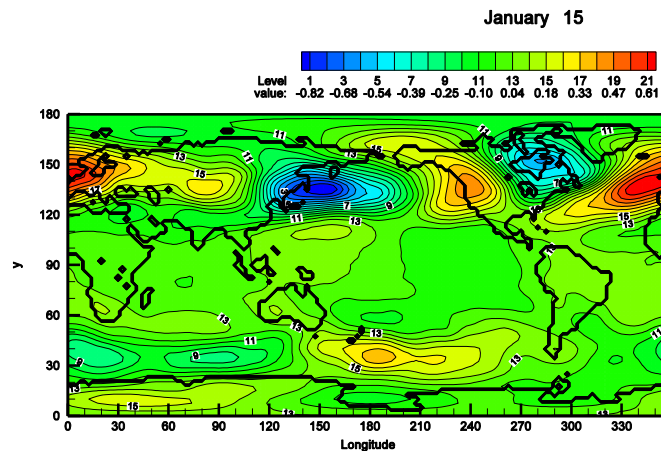
# Методы ортогональной декомпозиции фазовых пространств климато-экологической информации и результатов математического моделирования

- выявление элементов долговременной памяти климатической системы;
- анализ изменчивости многокомпонентных 4D пространств;
- анализ климата как реализации поведения динамической системы.
- выявление центров действия в климато-экологической системе
- формирование стратегий направленного мониторинга

Анализ климатических данных в терминах ортогональных подпространств дает возможность выделить доминирующие структуры в общей системе и использовать их для построения сценариев прогноза

# Methods of orthogonal decomposition. Subspaces of informative basis

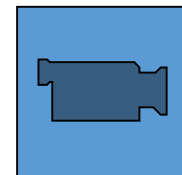
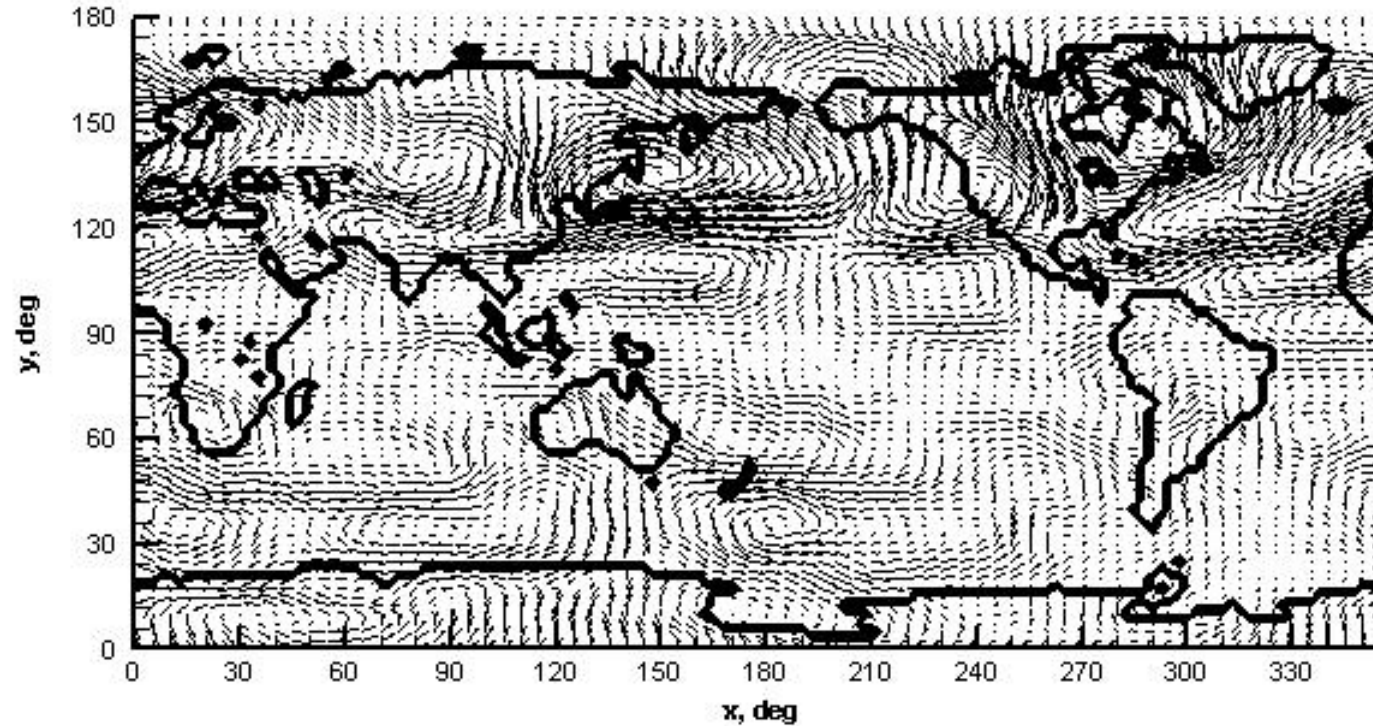
Activity centers of the climatic system



Penenko V., Tsvetova E. Orthogonal decomposition methods for inclusion of climatic data into environmental studies//Ecol. Model. V. 217. P. 279–291. 2008.

# Leading basis subspace for horizontal velocities for 56 years

January 15





# PEEX-Modelling-Platform (PEEX-MP)

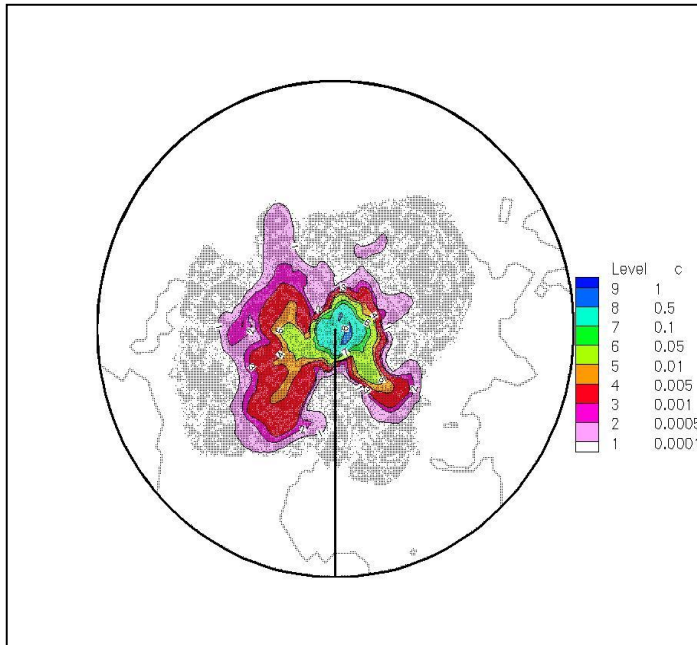


- **ATMES - Atmospheric Transport and dispersion Models of global and regional scales for climatic Environmental Studies**
- **MMAD&IT - Mesoscale Models of Atmospheric Dynamics and Impurity Transport in areas with complex terrain**
- **IMDAF - Inverse Modeling and Data Assimilation Framework**

<https://www.atm.helsinki.fi/peex/index.php/modelling-tools-demonstration>.

# Оценка экологических перспектив для природных объектов в региональном масштабе

## Арктика

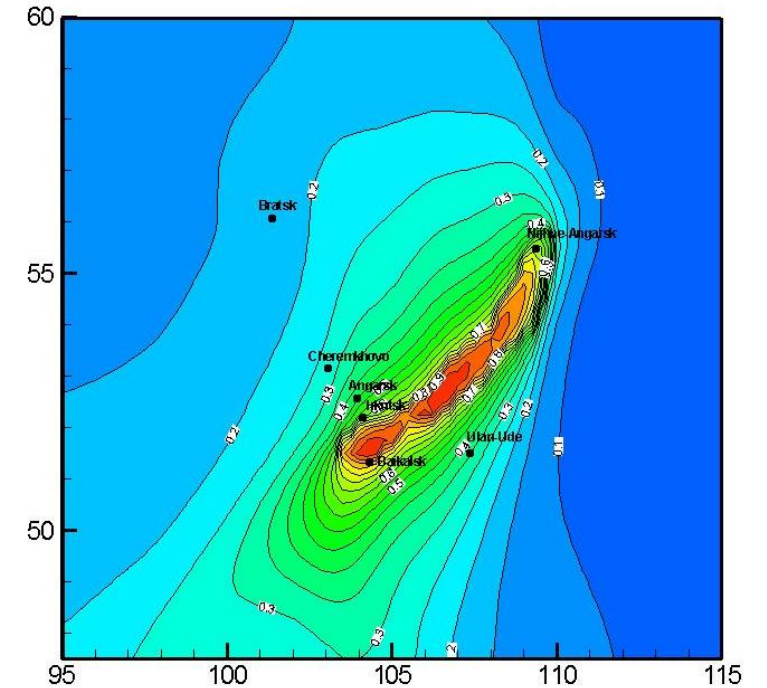


Функция риска получения загрязнений Арктикой от действующих и потенциально возможных источников, в Северном полушарии Земли (обратная задача).

## Байкальский регион



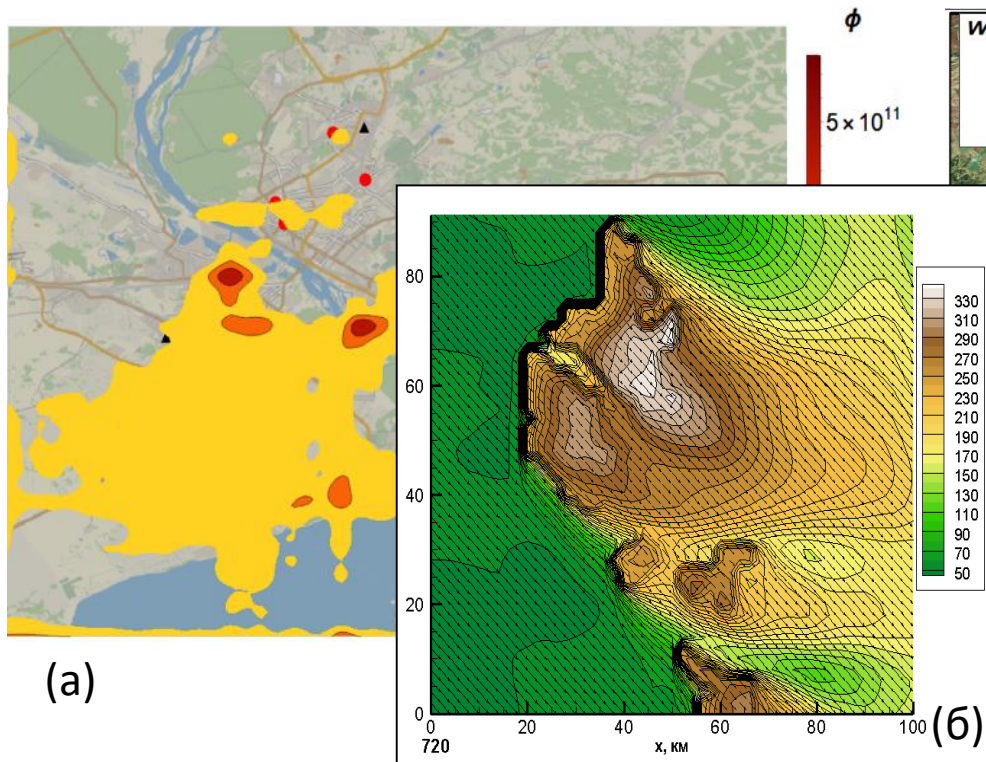
Изолинии концентраций общего содержания примесей (усл. ед.) на высоте 100 м над рельефом в 8 час. мест. вр. Северо-западный фоновый поток (прямая задача).



Районирование Байкальского региона по степени опасности загрязнения акватории озера (обратная задача).

# Оценка экологических перспектив для индустриальных регионов, городов, промышленных объектов

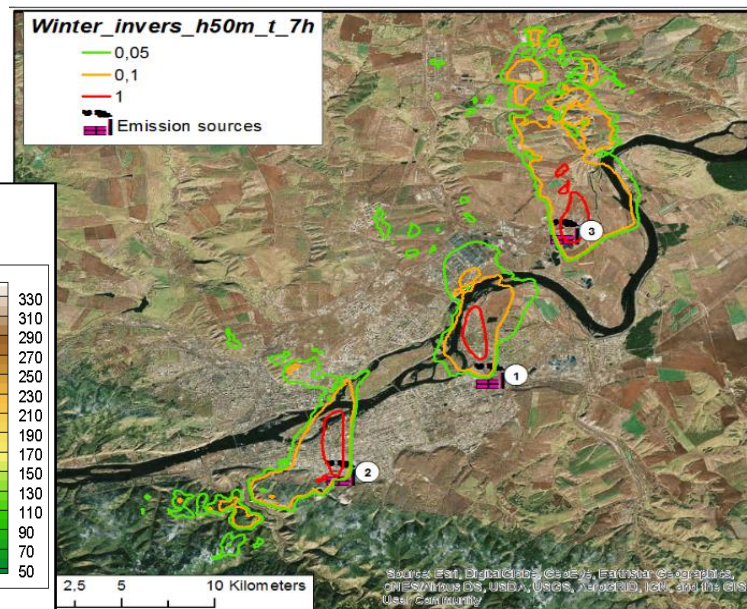
## Новосибирск



(a)

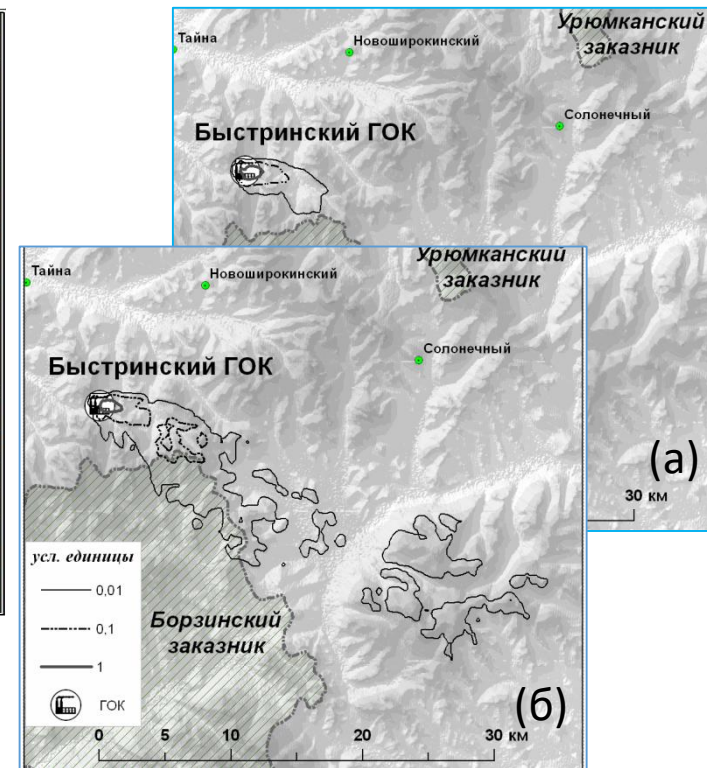
Усвоение данных мониторинга химического состава атмосферы и построение прогноза (a) и моделирование распространения загрязнений от распределенных источников примеси, расположенных в городской агломерации (b)

## Красноярск



Зимний сценарий распространения примесей городской черте в условиях сформировавшейся инверсии от трех источников: ТЭЦ (1),(2),(3).

## Забайкалье



(a)

(б)

Оценка влияния ГОКа на Быстринском золото-железо-медном месторождении: распространение тяжелых (a) и легких (б) примесей



# Система моделирования химического состава атмосферы с усвоением данных мониторинга

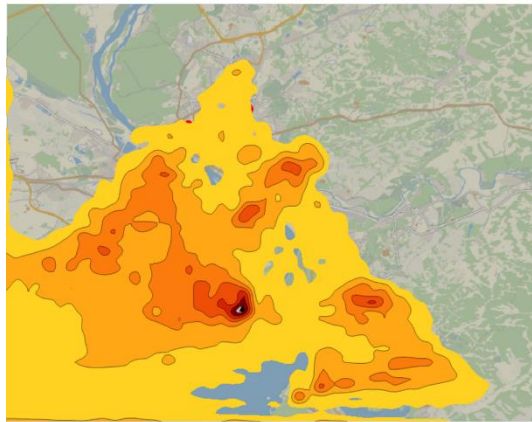


# Усвоение данных

## 3D модель с учетом химических трансформаций

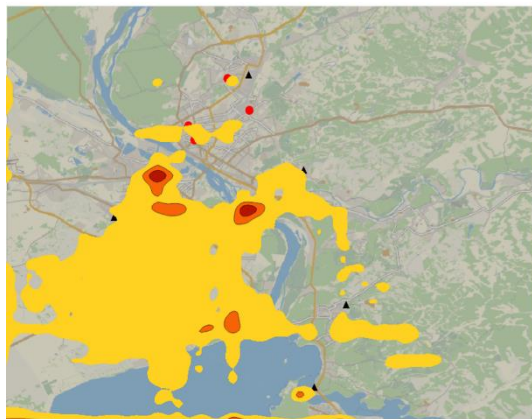
«Точное  
Решение»

NO2 t=08:39 Exact



(a)

NO2 t=08:39 DA  $\rho=0$   $\eta=10$



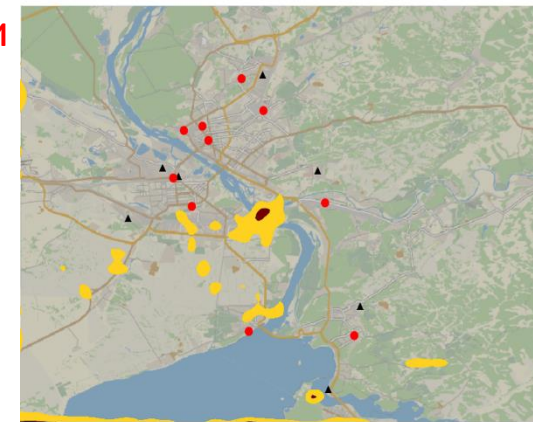
(c)

Усвоение  
данных  
Модификация  
для рутинных  
загрязнителей

9 постов наблюдений  
Полное отсутствие информации  
об источниках !

Доклад Пененко А.В., Мукатова  
Ж.С. Численное исследование  
прямого вариационного алгоритма  
усвоения данных и изучение  
зависимости от параметров  
сглаживания в городских условиях

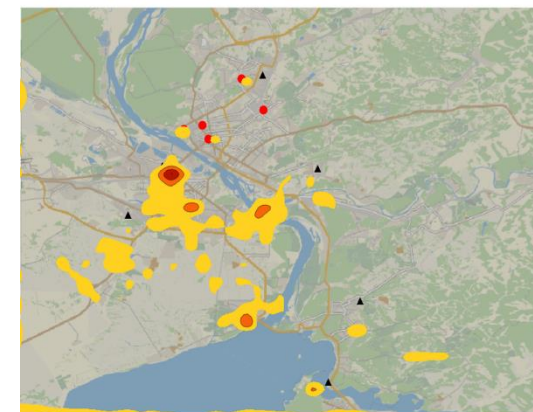
NO2 t=08:39 NO DA



(b)

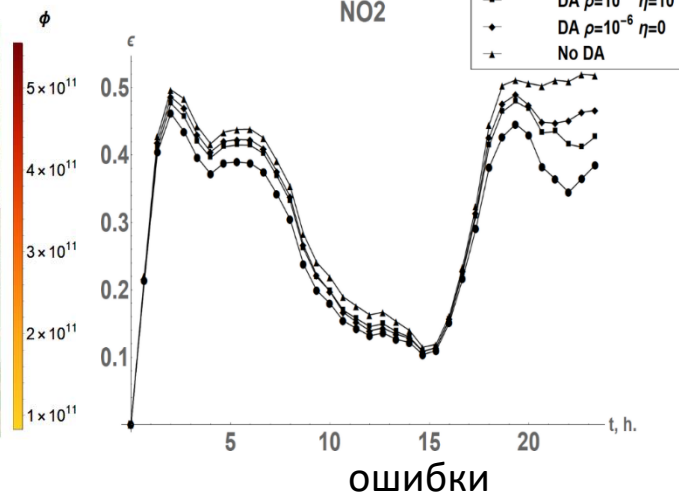
Без  
усвоения

NO2 t=08:39 DA  $\rho=10^{-6}$   $\eta=0$



(d)

Усвоение  
данных  
Модификация  
для редких  
загрязнителей



Параллельная реализация на мощностях Сибирского  
суперкомпьютерного центра

# Усвоение данных

## 3D модель с учетом химических трансформаций

«Точное  
Решение»

HCHO t=08:39 Exact



(a)

HCHO t=08:39 DA  $\rho=0$   $\eta=10$

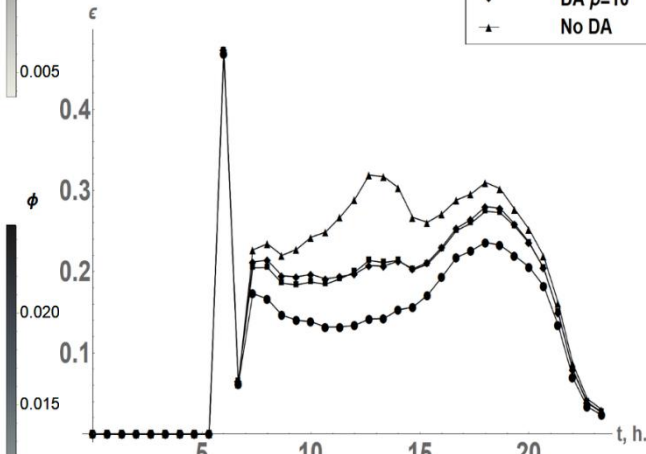
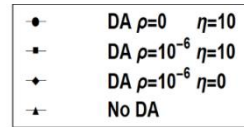


(c)

Усвоение  
данных  
Модификация  
для рутинных  
загрязнителей

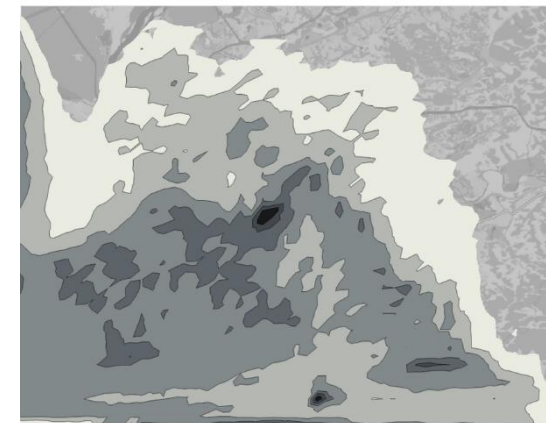
9 постов наблюдений  
Полное отсутствие информации  
об источниках !

HCHO



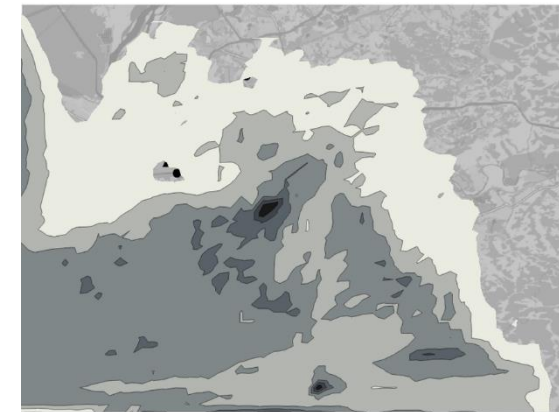
Динамика ошибки  
по всей области

HCHO t=08:39 NO DA



(b)

HCHO t=08:39 DA  $\rho=10^{-6}$   $\eta=0$



(d)

«Без  
Усвоения»

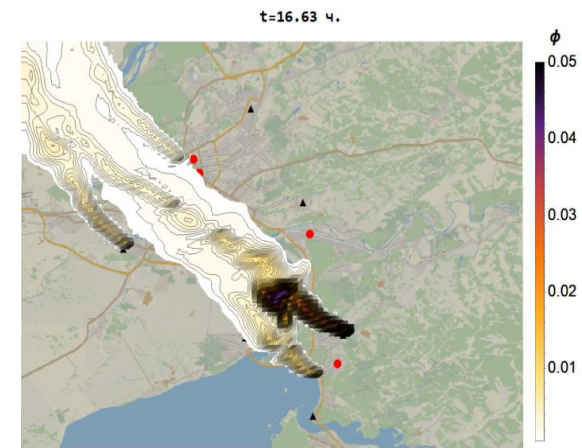
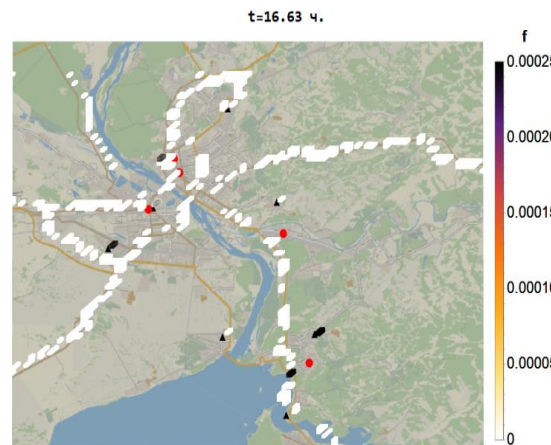
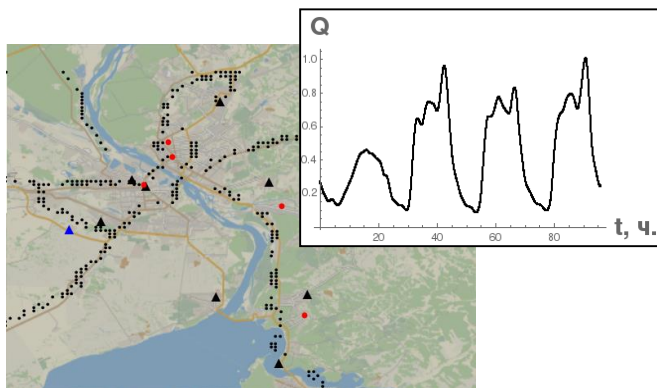
Усвоение  
данных  
Модификация  
для редких  
загрязнителей

Параллельная реализация на мощностях Сибирского  
суперкомпьютерного центра

# Задача оценки источников загрязнения атмосферы

345 неизвестных, 43 измерения = 3 дня x 3 изм. x 5 постов

(без учета априорной информации 2879\*100\*100 неизвестных)

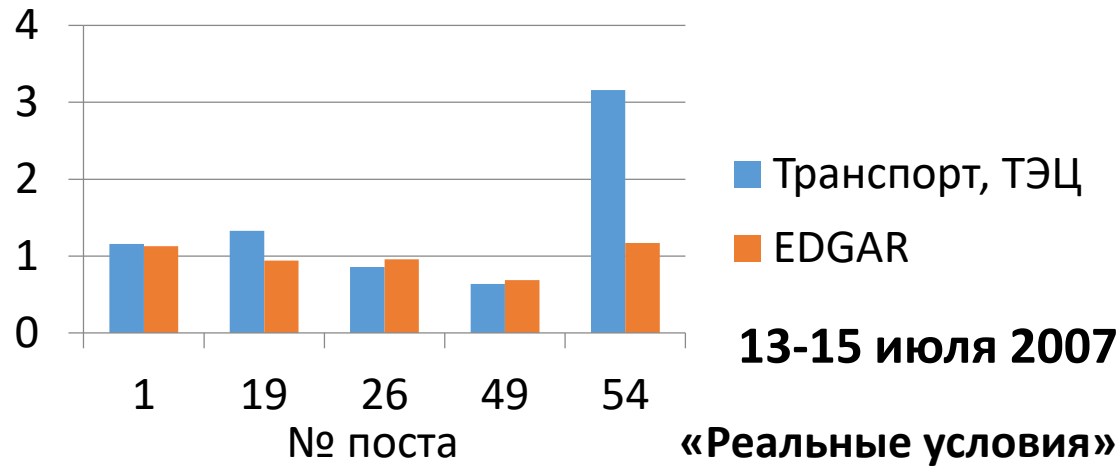


Доклад  
Гочаков А.В.,  
Пененко А.В и др.

Моделирование распространения примесей в городских условиях с учетом априорной и восстановленной информации

# Результаты тестирования

345 неизвестных, 43 измерения ~ 3 дня x 3 изм. x 5 постов



При имеющемся количестве данных измерений и решении обратной задачи удается получить результат, сопоставимый с моделированием для известных баз данных источников загрязнений.

Доклад  
Гочаков А.В.,  
Пененко А.В и др.

Моделирование распространения примесей в городских условиях с учетом априорной и восстановленной информации

345 неизвестных, 43 измерения = 3 дня x число изм. x 5 постов

Число измерений	45	60	70	75	90
Относительная ошибка восстановления источника	82%	82%	65%	66%	65%
Относительная ошибка восстановления уровня загрязнений	64%	65%	48%	46%	46%

**«Идеальные условия»**





# Заключение



Основная идея: разработка методов оптимизации для целей направленного мониторинга и оценок экологических перспектив

**Применение вариационного принципа дает возможность построить 5 фундаментальных пространств :**

- **Функции состояния прямых задач**
- **Решения сопряженных задач**
- **Функции неопределенностей моделей процессов**
- **Функции чувствительности моделей процессов и целевых функционалов к вариациям параметров моделей, начальных данных, функций краевых условий и источников воздействий**
- **Функции чувствительности целевых функционалов к вариациям данных наблюдений**

**Применение к этим функциональным пространствам методов ортогональной спектральной декомпозиции по масштабам процессов ( по заданным критериям) дает возможность решения прямых и обратных задач анализа и прогноза, в том числе, выявление центров действия, областей чувствительности, обнаружение источников воздействий и организации направленного мониторинга по заданным целевым критериям.**

Доклад  
Пененко А.В.  
Алгоритмы обратного  
моделирования переноса и  
трансформации примесей в  
атмосфере

Вторник, 10 июля



# Основные публикации

1. Penenko V. V., Penenko A. V., Tsvetova E. A. Variational approach to the study of processes of geophysical hydro-thermodynamics with assimilation of observation data // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. — 2017. — Vol. 58, no. 5. — P. 771–778.
2. Penenko, V. V., Tsvetova, E. A., and Penenko, A. V. , “Development of variational approach for direct and inverse problems of atmospheric hydrothermal dynamics and chemistry,” Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics, 51(3), 311–319 (2015).
3. [Penenko, V.V.](#), [Tsvetova, E.A.](#), [Penenko, A.V.](#), “ Methods based on the joint use of models and observational data in the framework of variational approach to forecasting weather and atmospheric composition quality,” Russ. Meteor. Hydr. 40(6), 365-373 (2015).
4. A. V. Penenko, V. V. Penenko, and E. A. Tsvetova Sequential data assimilation algorithms for air quality monitoring models based on a weak-constraint variational principle // Numerical Analysis and Applications, 9(4):312–325, 2016. doi: 10.1134/s1995423916040054
5. A. Penenko, V. Penenko, and Z. Mukatova Direct data assimilation algorithms for advection-diffusion models with the increased smoothness of the uncertainty functions. In 2017 International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON), pages 126–130, 2017. doi: 10.1109/SIBIRCON.2017.8109853
6. V.V. Penenko and E.A. Tsvetova and A.V. Penenko Variational approach and Euler’s integrating factors for environmental studies // Computers and Mathematics with Applications (2014) v.67 №. 12 2240 - 2256 doi: 10.1016/j.camwa.2014.04.004

# Спасибо за внимание!



**В докладе использованы  
результаты работы  
неформального творческого  
коллектива:**

**Пененко А.В.,  
Пененко В.В.,  
Пьянова Э.А.,  
Цветова Е.А.,  
Мукатова Ж.С.,  
Антохин П.Н.,  
Гочаков А.В.,  
Колкер А.Б.**

# Метод ортогональной декомпозиции данных

1. Исходная база данных представляется в виде  $(N \times M)$ -матрицы

$$A = \{\boldsymbol{\varphi}_i = \{\varphi_i(k)\}\} \equiv a_j^{(i)}, \quad i = \overline{1, M}, \quad j = \overline{1, N}, \quad M < N$$

$i$  - номер вектора-столбца,  $M$  - число столбцов,

$j$  - номер вектора-строки,  $N$  - число строк

$k$  - множество мульти-индексов вектора-столбца.

Совокупность фазовых векторов  $\boldsymbol{\varphi}_i$  организуется по аналогии с линейными пространствами Крылова.

2. Сингулярное разложение  $(N \times M)$ -матрицы  $A$  на совокупность ортогональных подпространств правых и левых сингулярных векторов матрицы  $A$ , ранжированных по величине собственных значений  $(M \times M)$ -матрицы

Грама  $A^* A$

## Алгоритм декомпозиции данных

$$A = V_N U_M, \quad V_N \in R_N, \quad U_M \in R_M \quad (1)$$

$$A \mathbf{u} = \sigma \mathbf{v} \Rightarrow A A^* \mathbf{v} = \sigma^2 \mathbf{v} \equiv \lambda \mathbf{v} \quad (2)$$

$$A^* \mathbf{v} = \sigma \mathbf{u} \Rightarrow A^* A \mathbf{u} = \sigma^2 \mathbf{u} \equiv \lambda \mathbf{u} \quad (3)$$

1. Решение полной спектральной проблемы (3)

$$\{\mathbf{u}_i; \lambda_i = \sigma_i^2\}, \quad (\mathbf{u}_i^T, \mathbf{u}_\alpha) = \delta_{i\alpha} \lambda_i, \quad i, \alpha = \overline{1, M_0}$$

$$\{\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{M_0} > 0, \quad M_0 \leq M\}, \quad U_M = \{\mathbf{u}_i, \quad i = \overline{1, M_0}\}$$

2. Расчет совокупности левых сингулярных векторов

$$V_N = \Sigma_{M_0}^{-1} A U_M, \quad \Sigma_{M_0} = \text{diag} \{\sigma_i, \quad i = \overline{1, M_0}\}$$

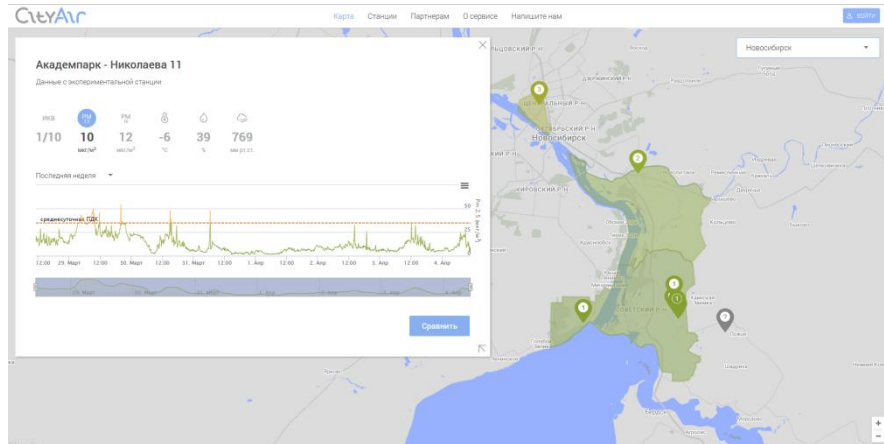
$$(\mathbf{v}_i^T, \mathbf{v}_\alpha) = \delta_{i\alpha}, \quad i, \alpha = \overline{1, M_0}, \quad V_N = \{\mathbf{v}_i, \quad i = \overline{1, M_0}\}$$

3. Расчет векторов с учетом масштабов возмущений в (1)

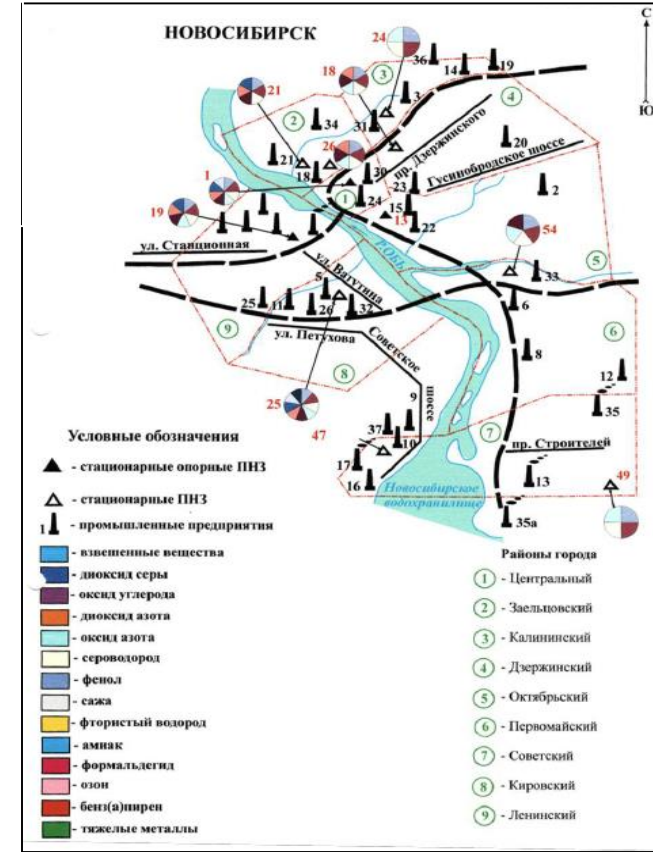
$$\varphi_i(k) = \sum_{p=1}^{M_0} v_p(k) u_p(i) \quad i = \overline{1, M_0}, \quad k = \overline{1, M}$$

# Проблема недостатка данных мониторинга качества воздуха в Новосибирске ( и других сибирских городах)

- **Государственная сеть мониторинга**  
Редкие измерения по времени и пространству
- **Частные сети мониторинга**
  - Автоматические измерения каждую минуту.
  - Готовность расширяться.
  - Но! Вопросы достоверности (регулярная проверка измерительного оборудования – дорогостоящая процедура).



Сайт <https://cityair.ru/novosibirsk/>. Фирма занимается производством и продажей оборудования для очистки воздуха в помещениях



[О состоянии и об охране окружающей среды Новосибирской области в 2015 году. Департамент природных ресурсов и охраны окружающей среды Новосибирской области. 2016]

- Для проверки данных различных сетей и поиска расположений для новых станций мониторинга в Н-ске предполагается дополнительно использовать мобильные лаборатории (автомобили, трамваи и т.д.)