

ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ АТМОСФЕРЫ, ГИДРОСФЕРЫ
И ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ

УДК 519.688

**Алгоритм усвоения данных на основе оператора
чувствительности для трехмерной модели переноса
и трансформации примесей в атмосфере**

А.В. Пененко^{✉ 1, 2}, А.В. Гочаков³, П.Н. Антохин^{2, 4*}

¹*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
630090, г. Новосибирск, ул. Академика Лаврентьева, 6*

²*Российский государственный гидрометеорологический университет
192007, г. Санкт-Петербург, ул. Воронежская, 79*

³*Сибирский региональный научно-исследовательский гидрометеорологический институт
630090, г. Новосибирск, ул. Советская, 30*

⁴*Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1*

Поступила в редакцию 29.01.2024;
после доработки 20.05.2024;
принята к печати 19.06.2024

Трехмерные модели переноса и трансформации примеси позволяют учитывать вертикальную неоднородность атмосферных процессов. Однако их использование требует задания большого количества параметров и существенных вычислительных ресурсов для проведения расчетов, особенно при решении обратных задач и задач усвоения данных. Представлен новый алгоритм усвоения данных для трехмерной модели переноса и трансформации примесей с неизвестными источниками, в котором используется подход на основе операторов чувствительности и ансамблей решений сопряженных уравнений, реализованный в системе обратного моделирования IMDAF для вычислительных комплексов с распределенной памятью. При тестировании на реалистичном сценарии для Байкальского региона алгоритм позволил по данным интегральных измерений по вертикали, моделирующим результаты дистанционного зондирования, уменьшить ошибку расчета поля концентрации примесей на 15%. При дополнительном указании уровня расположения источника по вертикали ошибка расчета поля концентраций сократилась на 93%, ошибка задания функции источника — на 85%.

Ключевые слова: усвоение данных, идентификация источников, адвекция–диффузия–реакция, оператор чувствительности, сопряженные уравнения; data assimilation, source identification, advection-diffusion-reaction, sensitivity operator, adjoint equations.

Введение

При моделировании сложных природных процессов, к которым относятся перенос и трансформация примесей в атмосфере, задание всех необходимых для моделирования параметров является нетривиальной проблемой, которую можно решать различными способами. Например, недостающую информацию можно восполнить по имеющимся данным измерений с помощью специальных алгоритмов обратного моделирования, включая алгоритмы усвоения данных. Для реалистичного описания процессов переноса и трансформации примесей в атмосфере используются трехмерные (3D) модели типа адвекция–диффузия–реакция, реализованные в виде систем компьютерного моделирования,

таких как WRF-Chem [1, 2], COSMO-ART [3], EnviroHIRLAM [4] и др.

Воспроизведение вертикальной неоднородности атмосферы — важный фактор повышения точности моделирования, однако при этом увеличивается сложность модели и требования к вычислительным мощностям. Учет вертикальной структуры, несомненно, важен при интерпретации данных дистанционного зондирования, которые зачастую представлены в виде интегральных измерений концентраций примесей по толще атмосферы. Даже для решения задач прямого моделирования, когда все необходимые параметры модели считаются заданными, требуются существенные вычислительные ресурсы. При этом решение задач обратного моделирования обычно эквивалентно решению множества прямых задач. Следовательно, возникает проблема поиска компромисса между реалистичностью и возможностью получить приемлемый результат за приемлемое время.

* Алексей Владимирович Пененко (aleks@ommgr.ssc.ru); Александр Владимирович Гочаков (gochakov@sibnigmi.ru); Павел Николаевич Антохин (apn@iao.ru).

Традиционные постановки обратных задач, когда все данные наблюдений за исследуемый период времени известны до начала моделирования, не позволяют работать с системами, состояние которых необходимо оценивать в реальном времени и на потенциально неограниченном временном интервале. Специально для этого случая формулируются задачи усвоения данных, которые мы формализуем как последовательности связанных обратных задач на наборе временных интервалов, называемых окнами усвоения. Каждая из обратных задач последовательности имеет свои искомые переменные и наборы доступных данных измерений. Результаты решения предыдущих задач из последовательности используются как априорная информация для последующих. Классическими подходами к решению задач усвоения данных являются вариационные алгоритмы, различные фильтры Калмана и фильтры частиц [5, 6]. В классических вариационных подходах [7–10] при решении обратных задач в окнах усвоения используются градиентные оптимизационные алгоритмы. Градиенты целевых функционалов вычисляются с помощью решения сопряженных уравнений [11–13].

В разрабатываемом авторами алгоритме усвоения данных для решения обратных задач на окнах усвоения использован подход на основе операторов чувствительности и ансамблей решений сопряженных уравнений [14–17], восходящий к работе Г.И. Марчука [18]. Достоинство подхода — возможность его эффективного распараллеливания на современных вычислительных системах [17]. Кроме того генерируемые алгоритмом агрегаты можно использовать для последующего уточнения решения методами машинного обучения [19]. В [20] разрабатываемая схема усвоения данных тестировалась для двумерной по пространству модели в абстрактной постановке. Наличие кластерной версии [17] позволяет в настоящей работе протестировать алгоритм на региональных трехмерных задачах усвоения данных мониторинга.

Таким образом, новым элементом, по сравнению с [16, 17, 20, 21], является применение разработанного в [16, 17, 21] алгоритма решения обратных задач и алгоритма усвоения данных [20] к трехмерной модели переноса и трансформации примесей. В численных экспериментах мы сравнили по точности и времени вычислений решения обратных задач, когда все имеющиеся данные измерений считаются доступными к началу моделирования, и задач усвоения данных, когда данные измерений поступают в ходе моделирования.

В разрабатываемом нами подходе параметры математических моделей условно делятся на «заданные» и «функции неопределенности», которые и используются для подстройки модели к имеющимся данным наблюдений. В качестве основной функции неопределенности в настоящем исследовании выбраны функции источников, так как они во многом определяют результат моделирования качества воздуха [22, 23]. Численные эксперименты проведены для Байкальского региона, как и в [16], но с моделями процессов в трехмерной постановке.

Данные измерений заданы в виде «снимков» интегральных концентраций по высоте.

Цель настоящей работы — представить результаты разработки и тестирования нового алгоритма усвоения данных для трехмерной по пространству модели переноса и трансформации примесей в атмосфере, основанного на операторах чувствительности и ансамблях решений сопряженных уравнений.

1. Методы и алгоритмы

1.1. Постановка задач

Математическая модель для описания распространения реагирующих химических веществ рассматривается в области $\Omega_T = \Omega \times [0, T]$, где Ω — достаточно гладкая аппроксимация ограниченной прямоугольной области $[0, X] \times [0, Y] \times [0, Z]$ в $\mathbb{R}^3$, $T > 0$, $\partial\Omega$ — граница области Ω и $[t, \bar{t}] \subset [0, T]$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_l}{\partial t} - \nabla \cdot (\text{diag}(\mu_l) \nabla \varphi_l - \mathbf{u} \varphi_l) + P_l(t, \varphi) \varphi_l = \\ = P_l(t, \varphi) + f_l + r_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [t, \bar{t}], \end{aligned} \quad (1)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\text{diag}(\mu_l) \nabla \varphi_l) = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(\text{out})} \subset \partial\Omega \times [t, \bar{t}], \quad (2)$$

$$\varphi_l = \alpha_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(\text{in})} \subset \partial\Omega \times [t, \bar{t}], \quad (3)$$

$$\varphi_l = \varphi_l^0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = t, \quad (4)$$

$$l = 1, \dots, N_c, \quad (5)$$

где $t \in [0, T]$ — время; $\mathbf{x}$ — пространственные координаты; t и $\bar{t}$ — верхняя и нижняя границы рассматриваемого временного интервала; N_c — число рассматриваемых веществ; $\varphi_l = \varphi_l(\mathbf{x}, t)$ — концентрация l -того вещества в точке $(\mathbf{x}, t) \in \Omega_T$; φ — вектор, состоящий из элементов $\varphi_l(\mathbf{x}, t)$, который называется функцией состояния; $L = \{1, \dots, N_c\}$ — множество индексов. Функции $\mu_l(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^3$ соответствуют коэффициентам диффузии; $\text{diag}(\mathbf{a})$ — диагональная матрица с вектором $\mathbf{a}$ на диагонали; $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^3$ — вектор скорости ветра. Скорости должны удовлетворять условиям неразрывности сплошной среды. $\Gamma^{(\text{in})}$ — части границы области, на которых вектор $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ направлен внутрь/равен нулю; $\Gamma^{(\text{out})}$ — части границы области, на которых вектор $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ направлен из области; $\mathbf{n}$ — вектор внешней нормали. Функции $\alpha_l(\mathbf{x}, t)$, $\varphi_l^0(\mathbf{x})$ описывают граничные и начальные условия, $\alpha_l(\mathbf{x}, t)$ соответствует «фоновой» концентрации l -й примеси за границами области; $f_l(\mathbf{x}, t)$ — известная *a priori* функция источника; $r_l(\mathbf{x}, t)$ — неизвестная функция источника. Элементы операторов продукции и деструкции $P_l, \Pi_l: [0, T] \times \mathbb{R}_+^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}_+$ определены моделью трансформации; при этом выражения для операторов, полученные из кинетических уравнений для счетных концентраций, переписаны для работы с массовыми концентрациями; операторы должны обеспечивать сохранение суммарной массы реагирующих веществ. В качестве функции неопределенности будем рассматривать вектор-функции $\mathbf{q} = \{r_l(\mathbf{x}, t)\}_{l=1}^{N_c}$, имеющие смысл источников выбросов.

Оператором прямой задачи назовем оператор $\Phi[\mathbf{q}]$, который отображает искомую функцию распределения источников выбросов $\mathbf{q} \in Q$ в решение Φ задачи (1)–(5). Задачу вычисления $\Phi[\mathbf{q}]$ по $\mathbf{q} \in Q$ назовем прямой. Здесь Q обозначает множество предполагаемых искомым функций источников выбросов. В нашем случае источники выбросов $\mathbf{q}$ из Q предполагаются стационарными ($r_i(\mathbf{x}, t) = r_i(\mathbf{x})$), неотрицательными ($r_i(\mathbf{x}, t) > 0$); они выбрасывают определенный набор веществ $L_{src} \subset L$ ($r_i(\mathbf{x}, t) = 0$, $l \notin L_{src}$). Относительно распределения источников по вертикали рассматриваются два варианта: источники могут разыскиваться по всей толще атмосферы или только в «приземном» слое модели.

Пусть в Q существует некоторая «истинная» функция источника, обозначим ее $\mathbf{q}^{(*)} \in Q$, и $\Phi^{(*)} = \Phi[\mathbf{q}^{(*)}]$ — соответствующее решение прямой задачи с функцией источника $\mathbf{q}^{(*)}$. В обратной задаче $\mathbf{q}^{(*)}$ неизвестна и ее требуется найти на основе пространственных «снимков» $\Phi^{(*)}$ интегральных (total-column) концентраций для заданного набора веществ L_{meas} , сделанных в моменты времени $\Theta = \{\theta^m\}_{m=1}^M \subset [0, T]$, где M — количество моментов времени, в которые доступны снимки:

$$\left\{ \int_0^Z \Phi_l^{(*)}(\mathbf{x}, y, z, \theta^m) dz = I_l^m(\mathbf{x}, y) \mid (\mathbf{x}, y) \in [0, X] \times [0, Y], l \in L_{meas} \subset L \right\}.$$

Определим множество W окон усвоения $[\underline{t}^{[k]}, \bar{t}^{[k]}] \subset [0, T]$, $k = 1, \dots, N_w$. Окон усвоения не пересекаются, $\bar{t}^{[k]} = \underline{t}^{[k+1]}$, $\underline{t}^{[1]} = 0$. Задача усвоения данных формулируется как последовательность связанных обратных задач на W . Искомые источники выбросов $\mathbf{q}$ предполагаются постоянными в окнах усвоения. Для поиска источников используются данные измерений, попадающие в окно усвоения: $\{I_l^m \mid \theta^m \in [\underline{t}^{[k]}, \bar{t}^{[k]}]\}$. Функция состояния при переходе из одного окна усвоения в другое считается непрерывной: $\Phi(\bar{t}^{[k]}) = \Phi(\underline{t}^{[k+1]})$. В качестве начального приближения для решения в k -м окне усвоения используется результат решения на предыдущем окне: $q^{[k+1](0)} = q^{[k](\infty)}$.

Задача усвоения данных, в отличие от обратной задачи, нацелена на численное решение в неограниченном по времени интервале ($T \rightarrow \infty$), соответствующем процессу мониторинга. Если при каждом новом поступлении данных измерений рассматривать новую обратную задачу на увеличивающихся временных интервалах (или эквивалентно зафиксировать $\underline{t}^{[k]} = 0$), то количество переменных численной модели может неограниченно возрастать и рано или поздно переполнять память ЭВМ. При решении только прямой задачи такой проблемы обычно не возникает, так как для ее решения в памяти достаточно сохранять переменные, соответствующие только нескольким временным шагам модели. Для преодоления этой вычислительной трудности окна усвоения предполагаются ограниченными даже при потенциально неограниченном интервале моделирования.

Таким образом, задача усвоения данных — более общая по отношению к обратной задаче (которая является ее частным случаем при $N_w = 1$, $[\underline{t}^{[1]}, \bar{t}^{[1]}] = [0, T]$). Алгоритм усвоения данных состоит из двух компонентов: алгоритма решения обратных задач на окнах усвоения и способа переноса результатов решения с одного окна усвоения на следующее для формирования априорной информации.

1.2. Решение обратной задачи

Базовый алгоритм решения обратных задач для 3D-модели адвекции–диффузии–реакции является кластерной версией алгоритма на основе операторов чувствительности и ансамблей решений сопряженных уравнений [17, 23]. Алгоритм идентификации источников использует квазилинейное представление задачи. Если $\mathbf{q}^{(*)}$ — «истинное» распределение источников, I — данные измерений, агрегированные в форме функции состояния (т.е. они равны $\Phi^{(*)}$ в тех частях Ω_T , где измерения есть, и нулю там, где измерений нет), а δI — их возмущение (т.е. шум измерения), то для любых U и $\mathbf{q}$ справедливо соотношение

$$M_U[\mathbf{q}^{(*)}, \mathbf{q}](\mathbf{q}^{(*)} - \mathbf{q}) = H_U I + H_U \delta I - H_U \Phi[\mathbf{q}], \quad (6)$$

где

$$M_U[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}]z = \sum_{\xi=1}^{\Xi} \mathbf{e}^{(\xi)} \langle S[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; h^{(\xi)}], z \rangle_Q,$$

$$H_U \Phi = \sum_{\xi=1}^{\Xi} \mathbf{e}^{(\xi)} \langle h^{(\xi)}, \Phi \rangle_H,$$

где $\mathbf{e}^{(\xi)}$ — это ξ -й элемент канонического базиса в $\mathbb{R}^3$. Скалярные произведения определяются как $\langle a, b \rangle_H = \sum_{l=1}^{N_c} \int_0^T \int_{\Omega} a_l(\mathbf{x}, t) b_l(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt$, $\langle a, b \rangle_Q = \sum_{l=1}^{N_c} \int_{\Omega} a_l(\mathbf{x}) b_l(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$; $U = \{h^{(\xi)}\}_{\xi=1}^{\Xi}$ — набор проекционных функций; $S[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; h]$ — функция чувствительности, такая, что для любых $\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)} \in Q$ выполнены соотношения чувствительности

$$\langle S[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; h], \mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)} \rangle_Q = \langle h, \Phi[\mathbf{q}^{(2)}] - \Phi[\mathbf{q}^{(1)}] \rangle_H.$$

Каждая функция чувствительности является решением сопряженной задачи, определяемой ее проекционной функцией h . Квазилинейное операторное уравнение (6) можно использовать для решения обратной задачи. Для этого используется итерационный алгоритм типа Ньютона–Канторовича [15, 16]. Начальное приближение и результат работы алгоритма обозначим через $\mathbf{q}^{(0)}$ и $\mathbf{q}^{(\infty)}$ соответственно.

Для обработки данных типа total-column «снимков» используем следующую систему проектирования:

$$h^{(\xi)} = C(X, \theta_x^{(\xi)}, \theta_{\text{Snapshot}}^{(x)}, x) \times \\ \times C(Y, \theta_y^{(\xi)}, \theta_{\text{Snapshot}}^{(y)}, y) \delta(t - t^{(\xi)}) \delta(l - l^{(\xi)}),$$

где δ — соответствующие дельта-функции по времени и химическим веществам; $\xi = 1, \dots, \Xi_{\text{Snapshot}}$; $C(X, \theta, \Theta, x)$ — элементы системы ступенчатых функций на интервале $[0, X]$:

$$C(X, \theta, \Theta, x) = \begin{cases} \frac{\Theta}{X}, & x \in \left[\frac{X\theta}{\Theta}, \frac{X(\theta+1)}{\Theta} \right] \\ 0, & x \notin \left[\frac{X\theta}{\Theta}, \frac{X(\theta+1)}{\Theta} \right] \end{cases}.$$

Система проектирования имеет два параметра: $\theta_{\text{Snapshot}}^{(x)}$ и $\theta_{\text{Snapshot}}^{(y)}$, которые определяют пространственное разрешение рассматриваемых данных. Для любого изображения θ_x и θ_y находятся в диапазонах $0, \dots, \theta_{\text{Snapshot}}^{(x)} - 1$ и $0, \dots, \theta_{\text{Snapshot}}^{(y)} - 1$ соответственно. Следовательно, $\Xi_{\text{Snapshot}} = N_{\text{Snapshot}} \times \theta_{\text{Snapshot}}^{(x)} \times \theta_{\text{Snapshot}}^{(y)}$.

Представленный алгоритм был адаптирован для решения последовательности связанных обратных задач в рамках разрабатываемой авторами системы обратного моделирования IMDAF (Inverse Modeling and Data Assimilation Framework). Реализованы алгоритмические конструкции, обеспечивающие задание, решение и совместный учет результатов решения последовательности обратных задач. При тестировании нас будет интересовать соотношение по точности и времени вычислений между результатами работы алгоритмов усвоения данных и решения обратной задачи, определенной на всем интервале и учитывающей весь набор данных измерений.

1.3. Конфигурация моделей

В качестве региональной модели для вычисления метеорологических параметров выбрана известная модель WRF 4.2.1 [1, 2], в которой задействованы следующие параметризации физических процессов: микрофизика облаков [24], длинноволновое излучение [25], коротковолновое излучение [26], пограничный слой [27], поверхностный слой [28] и слой почвы [29]. Данный набор параметризаций был успешно опробован авторами в [30] для регионального сценария.

Установка модели и отладка региональной конфигурации проведена для области 48,0–59,8° с.ш. и 96,3–119,6° в.д. Область имеет шаг сетки по горизонтали 10000 м и включает 32 вертикальных уровня вплоть до уровня 50 ГПа. Средняя высота первого уровня модели соответствует 28,7 м от поверхности Земли. Для вычислительных экспериментов используется адаптивный временной шаг. Начальные и граничные условия для полей метеорологических переменных заданы с применением данных модели FNL (NCEP) [31] с шагом по времени 6 ч и разрешением по горизонтали 0,5°.

В модели (1)–(5) системы IMDAF используется горизонтальная система координат модели WRF. В качестве вертикальной применяется преобразованная система координат WRF: $z = 1 - \eta$, где η —

вертикальная координата модели WRF-Chem. Для задания коэффициентов модели (1)–(5) системы IMDAF выбраны переменные модели WRF, указанные в табл. 1.

Таблица 1
Переменные модели WRF, использованные при генерации коэффициентов модели (1)–(5)

Переменная	Расшифровка	Единица измерения
ALB	Обратная плотность воздуха	м ³ /кг
MUB	Разница гидростатических давлений между поверхностью и верхним уровнем модели для сухого воздуха	Па
XKHH	Коэффициент горизонтальной вихревой диффузии тепла	м ² /с
XKMV	Коэффициент вертикальной вихревой вязкости	м ² /с
MU_U	Горизонтальная скорость ветра по оси x , умноженная на разницу гидростатических давлений между поверхностью и верхним уровнем модели	(Па · м)/с
MU_V	Горизонтальная скорость ветра по оси y , умноженная на разницу гидростатических давлений между поверхностью и верхним уровнем модели	(Па · м)/с
WW	Вертикальная скорость ветра в η -координатах модели WRF, умноженная на разницу гидростатических давлений между поверхностью и верхним уровнем модели	Па/с

Коэффициенты модели (1)–(5) заданы следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x_i, y_j, z_k, t^p) &= \\ &= \frac{1}{\text{MUB}} [\text{MU_U}(x_i, y_j, z_k, t^p); \text{MU_V}(x_i, y_j, z_k, t^p); \\ &\quad -\text{WW}(x_i, y_j, z_k, t^p)]^T, \\ \mu_l(x_i, y_j, z_k, t^p) &= \\ &= \left[\text{XKHH}(x_i, y_j, z_k, t^p) \text{XKHH}(x_i, y_j, z_k, t^p) \times \right. \\ &\quad \left. \times \frac{g^2}{\text{MUB}^2 \text{ALB}} \frac{\text{XKMV}(x_i, y_j, z_k, t^p)}{\text{ALB}(x_i, y_j, z_k, t^p)} \right]^T, \end{aligned}$$

где черта сверху обозначает усреднение по всей области; x_i, y_j, z_k, t^p — точки соответствующих сеток по горизонтали, вертикали и времени.

Сетки в модели IMDAF уменьшены в три раза по сравнению с моделью WRF (по каждой пространственной координате используется каждый третий узел), что составляет $43 \times 44 \times 11$ узлов; шаг по времени — 120 с.

1.4. Сценарий обратного моделирования

Для тестирования алгоритма рассматривалась задача усвоения данных для области, изображенной на рис. 1, а (как и в [16]). Временной интервал

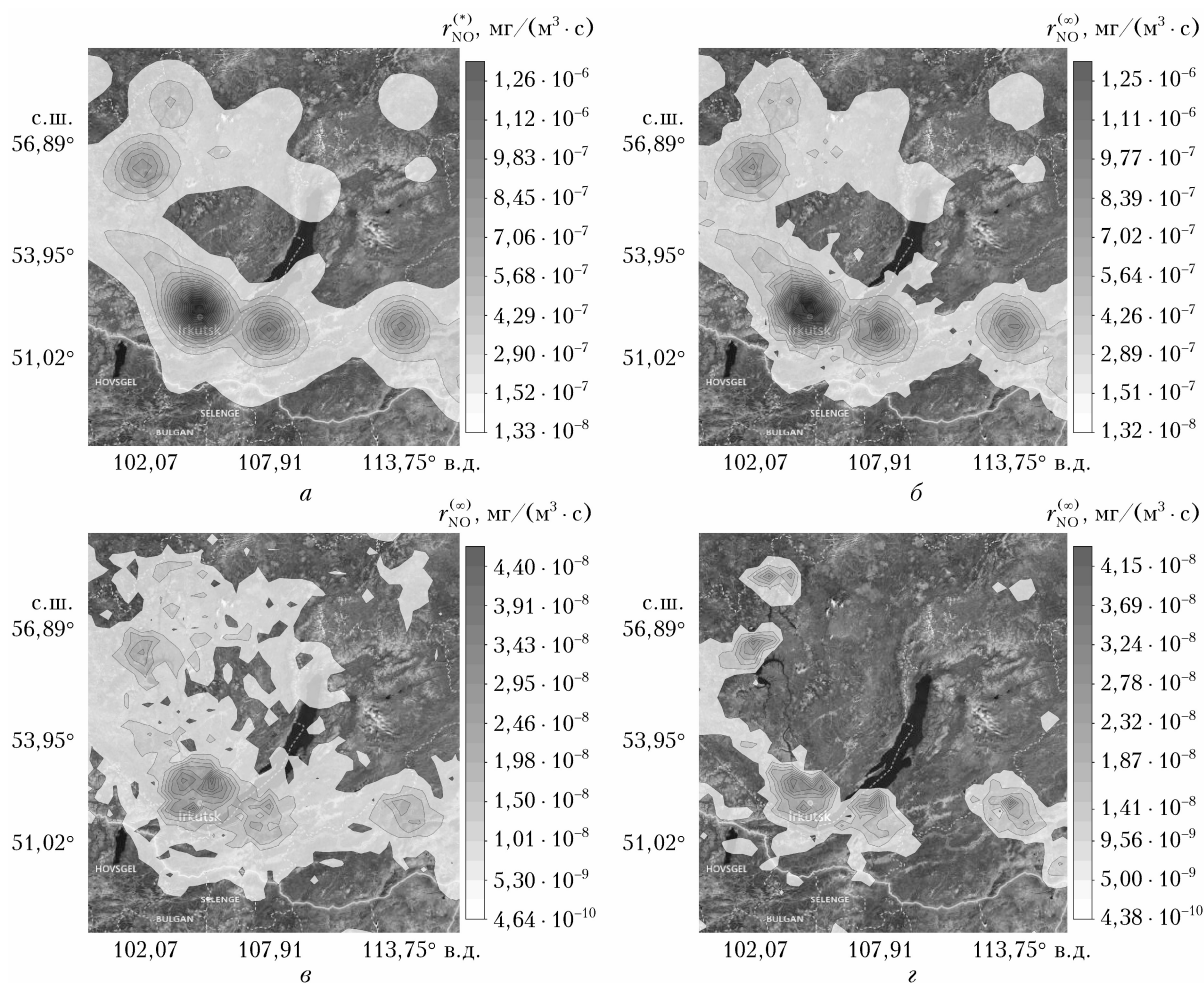


Рис. 1. Сравнение «истинного» распределения источников $r_{NO}^{(*)}$ (a) и результатов его оценки алгоритмом усвоения данных $r_{NO}^{(\infty)}$ в окне усвоения $[16 \times 3600, 24 \times 3600]$ с ограничением на расположение источника (б) и без него (z), а также результатов решения обратной задачи (в) без ограничения для $\theta_{Snapshot}^{(x)} \times \theta_{Snapshot}^{(y)} = 22 \times 22$

соответствует интервалу 00:00–24:00 24.07.2019 г. В модели (1)–(5) рассматривается взаимодействие между $N_c = 5$ химическими соединениями $\{O_3, NO, NO_2, O_2, O_3P\}$. Константы скоростей фотохимических реакций зависят от времени. В сценариях мы предполагаем, что «истинная» функция распределения источников $q^{(*)}$ состоит из стационарных источников, распределенных по горизонтали согласно рис. 1, а и расположенных по вертикали только на первом слое. Источники имеют различные неотрицательные мощности и выбрасывают только NO (т.е. $L_{src} = \{NO\}$). Следовательно, задача поиска $q^{(*)} = \{r_i^{(*)}(x, t)\}_{i \in \{O_3, NO, NO_2, O_2, O_3P\}}$ сводится к поиску функции $r_{NO}^{(*)}$. Соответствующий источнику NO результат работы алгоритма решения обратной задачи или усвоения данных будем обозначать $r_{NO}^{(\infty)}$. Для простоты начальные концентрации всех веществ, кроме O_2 и O_3 , заданы нулевыми: $\phi_{O_3}^0 = 0,05 \text{ мг/м}^3$, $\phi_{O_2}^0 = 284202 \text{ мг/м}^3$, $\phi_{NO}^0 = \phi_{NO_2}^0 = \phi_{O_3P}^0 = 0$. На границе $\Gamma^{(in)}$, где скорости ветра направлены внутрь области, параметр краевого условия соответствует фоновым концентрациям $\alpha_l = \phi_l^0$.

Расчеты выполняются на пространственной сетке с $N_x = 43$, $N_y = 44$, $N_z = 11$ точек. По времени задано $N_t = 711$ точек. Размерность функции состояния модели

$$N_t \times N_c \times N_x \times N_y \times N_z = 711 \times 5 \times 43 \times 44 \times 11 = 73986660.$$

В численных экспериментах сравниваются сценарии, когда учитывается априорная информация о том, что источники расположены только на первом вертикальном уровне модели («с ограничением по вертикали»), и когда не учитывается («без ограничения по вертикали»). В первом случае количество неизвестных 43×44 , а во втором — $43 \times 44 \times 11$.

Предполагаем, что в сценарии численного эксперимента измеряются концентрации озона O_3 ($L_{meas} = \{O_3\}$) и измерения заданы в виде мгновенных «снимков», проинтегрированных по высоте полей концентрации (total-column) по всей области через каждые четыре часа моделирования. Окно усвоения — восемь часов. Таким образом, общее количество данных измерений в обратной задаче $43 \times 44 \times 5$.

В представленном эксперименте количество изображений $N_{\text{Snapshot}} = 5$. Рассмотрены три системы проектирования с параметрами пространственного разрешения

$$\theta_{\text{Snapshot}}^{(x)} \times \theta_{\text{Snapshot}}^{(y)} \in \{4 \times 4, 16 \times 16, 22 \times 22\}$$

и, следовательно, с различным количеством функций проектирования.

Начальное предположение о распределении источников в обратной задаче и первом окне усвоения нулевое ($\mathbf{q}^{(0)} = 0$).

2. Результаты и обсуждение

Для различных конфигураций численных экспериментов в табл. 2 представлены относительные ошибки восстановления функции источника

$$\varepsilon_q = \frac{\|r_{\text{NO}}^{\infty} - r_{\text{NO}}^{(*)}\|_{4D}}{\|r_{\text{NO}}^{(*)}\|_{4D}}$$

и поля концентрации

$$\varepsilon_{\varphi} = \frac{\|\varphi_{\text{NO}}[q^{(\infty)}] - \varphi_{\text{NO}}[q^{(*)}]\|_{4D}}{\|\varphi_{\text{NO}}[q^{(*)}]\|_{4D}}$$

за весь временной интервал, где $\|\cdot\|_{4D}$ — евклидова норма для сеточных функций:

$$\|x\|_{4D} = \sqrt{\sum_{p=0}^{N_t-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} (x_{ijk}^p)^2}.$$

Кроме задач усвоения и обратной задачи в таблице для сравнения приведены параметры задачи по получению «фоновое» решения, т.е. решения без учета дополнительных данных измерений, сводящейся к решению прямой задачи с нулевым начальным приближением $\varphi[\mathbf{q}^{(0)}]$. Времена вычисления представлены для кластера NKS-1P Сибирского суперкомпьютерного центра с использованием трех узлов Intel Xeon Gold 6248 R (каждый имеет два процессора $\times$ 24 ядра $\times$ два вычислительных потока, 3,00 ГГц, 384 ГБ оперативной памяти). Общее количество используемых ядер составляет 144.

Узлы соединены с помощью Cluster Interconnect Omni-Path со скоростью 100 Гбит/с. В табл. 2 видно, что результаты усвоения данных требуют меньше вычислительных затрат, однако уступают результатам решения обратной задачи по точности.

На рис. 1 сравнивается «истинная» функция источника $r_{\text{NO}}^{(*)}$ (рис. 1, а) и результат оценки этой функции при $\theta_{\text{Snapshot}}^{(x)} \times \theta_{\text{Snapshot}}^{(y)} = 22 \times 22$ алгоритмом усвоения данных на первом вертикальном уровне модели с ограничением по вертикали (рис. 1, б) и без них (рис. 1, в), а также результат решения обратной задачи без ограничений (рис. 1, г). Алгоритм решения обратной задачи с ограничениями в этом случае находит решение практически точно (табл. 2), поэтому мы его здесь не приводим. Заметим, что только в этом эксперименте из всех перечисленных в табл. 2 количество учитываемых данных измерений Ξ_{Snapshot} превосходит количество неизвестных ($22 \times 22 \times 5 > 43 \times 44$).

Также на рис. 1 можно заметить, что во всех случаях основные источники локализируются по горизонтали достаточно точно, однако в случае без ограничений по вертикали их мощности занижены. Изучим вертикальное распределение восстановленного источника. На рис. 2 показан результат решения задачи усвоения данных алгоритмом в последнем окне усвоения для различных вертикальных уровней модели без использования ограничений на расположение источника. Так как «истинный» источник $r_{\text{NO}}^{(*)}$ задан только на первом уровне, то на последующих он в идеальном случае также должен восстанавливаться как нулевой.

Анализируя табл. 2, рис. 1 и 2, можно заключить, что учет ограничений на расположения источника по вертикали существенно влияет на точность решения. Можно предположить, что без ограничений источник распределяется между вертикальными уровнями из-за отсутствия какой-либо информации о вертикальном распределении в данных измерений. В будущем планируется изучить возможность восстанавливать вертикальную структуру решения с использованием нелинейных операторов измерений, связывающих переменные модели с данными измерений.

Таблица 2

Сравнение результатов решения обратных задач и усвоения данных

Задача	$\theta_{\text{Snapshot}}^{(x)} \times \theta_{\text{Snapshot}}^{(y)}$	Окно усвоения, ч	Ограничение по вертикали	Время вычислений, ч	ε_q	ε_{φ}
Фоновая	0	0	—	0,002	1	1
Усвоения данных	4×4	8	+	0,545	0,68	0,65
			—	0,564	0,99	0,89
Обратная	4×4	24	+	0,855	0,64	0,58
			—	0,588	0,99	0,86
Усвоения данных	16×16	8	+	1,693	0,25	0,13
			—	1,414	0,99	0,86
Обратная	16×16	24	+	2,4	0,17	0,08
			—	2,606	0,99	0,80
Усвоения данных	22×22	8	+	1,236	0,15	0,07
			—	2,16	0,99	0,85
Обратная	22×22	24	+	4,327	$7 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-11}$
			—	8,032	0,99	0,78

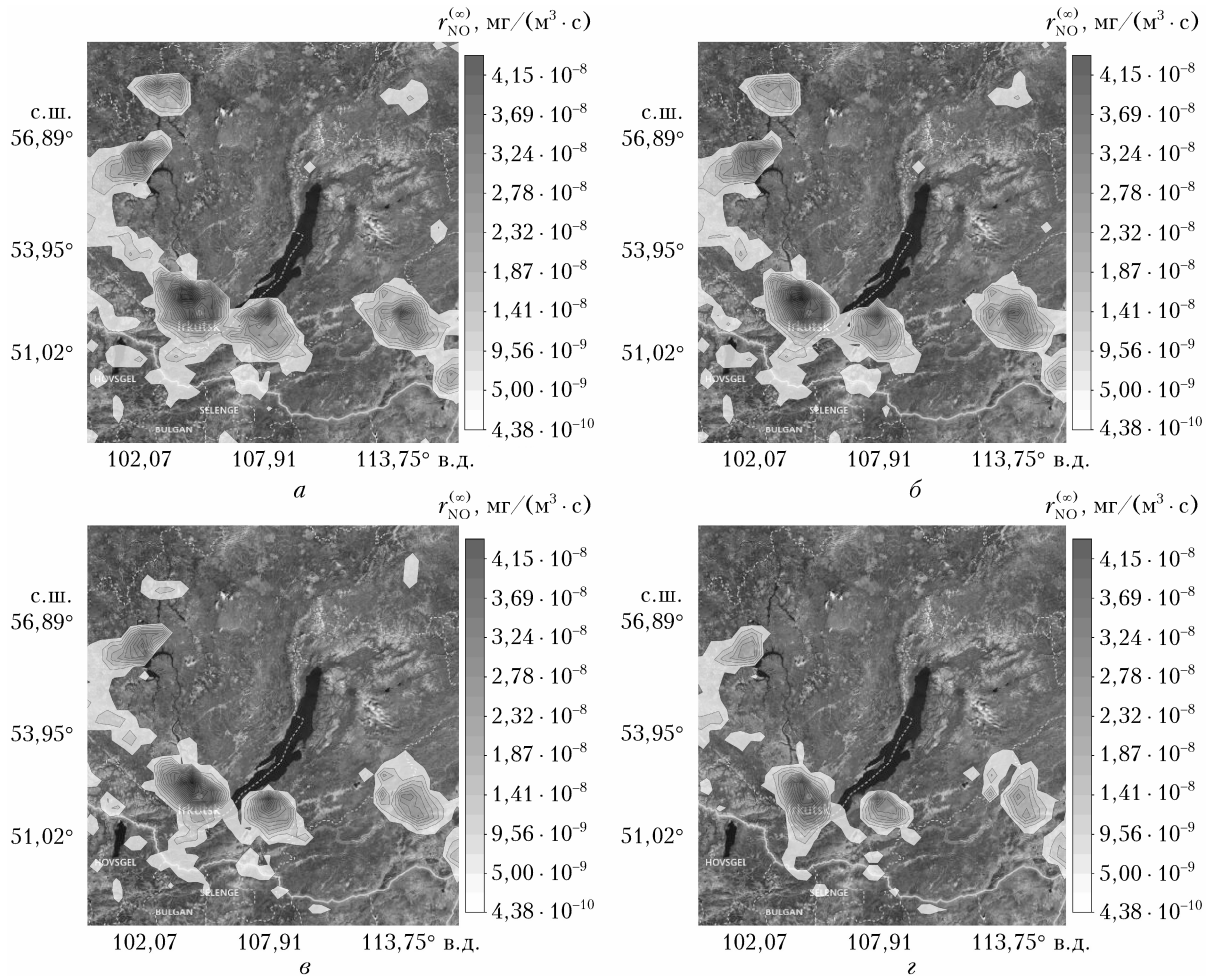


Рис. 2. Результат $r_{NO}^{(\infty)}$ восстановления источника в финальном окне усвоения $[16 \times 3600, 24 \times 3600]$ алгоритмом усвоения данных при $\theta_{Snapshot}^{(x)} \times \theta_{Snapshot}^{(y)} = 22 \times 22$ на различных вертикальных уровнях модели: втором (а), третьем (б), пятом (в), седьмом (г) без ограничений на расположение источников по вертикали

На рис. 3 приводится зависимость от модельного времени абсолютных ошибок восстановления источников $\bar{\epsilon}_q^1$ и функции состояния $\bar{\epsilon}_\phi^1$ алгоритмом усвоения данных (УД) и решения обратной задачи (ОЗ) для различных значений параметра $\theta_{Snapshot}^{(x)} \times \theta_{Snapshot}^{(y)}$:

$$\bar{\epsilon}_q^p = \left\| (r_{NO}^{(\infty)})^p - (r_{NO}^{(*)})^p \right\|_{3D},$$

$$\bar{\epsilon}_\phi^p = \left\| (\phi_{NO}[\mathbf{q}^{(\infty)}])^p - (\phi_{NO}[\mathbf{q}^{(*)}])^p \right\|_{3D}, \quad p = 0, \dots, N_t - 1.$$

Для вычисления нормы ошибки используется эвклидова норма для сеточных функций:

$$\|x\|_{3D} = \sqrt{\sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} \sum_{k=0}^{N_z-1} (x_{ijk})^2}.$$

Анализируя рис. 3, можно отметить, что оба алгоритма в представленном эксперименте показали результат лучше, чем без использования методов обратного моделирования («фоновое» решение $\phi[\mathbf{q}^{(0)}]$ соответствует нулевому источнику).

Анализируя табл. 2 и рис. 3, можно отметить, что относительная ошибка алгоритмов в части уточ-

нения полей концентраций ϵ_ϕ меньше, чем при восстановлении функций неопределенности в источниках ϵ_q . Это можно объяснить свойствами обратной задачи, приводящими к существованию эквивалентных решений, плохо различимых по имеющимся данным наблюдений. Поля концентраций в задачах анализа качества воздуха, наряду с источниками, являются важными переменными, по которым можно оценивать уровни загрязнения и, следовательно, воздействие качества воздуха на здоровье населения.

Системы усвоения данных предназначены для работы на потенциально полубесконечном временном интервале. Выбор текущего интервала моделирования обусловлен, во-первых, тем, что 24 ч — это период зависящих от времени коэффициентов модели трансформации. Кроме того, одной из целей работы было изучение соотношения точности и скорости между решениями обратной задачи и задачи усвоения данных, а выбранный интервал позволяет на имеющихся вычислительных ресурсах проводить требуемые сравнения за приемлемое время. В качестве будущей работы планируется изучить эффективность системы усвоения для более длительных временных интервалов.

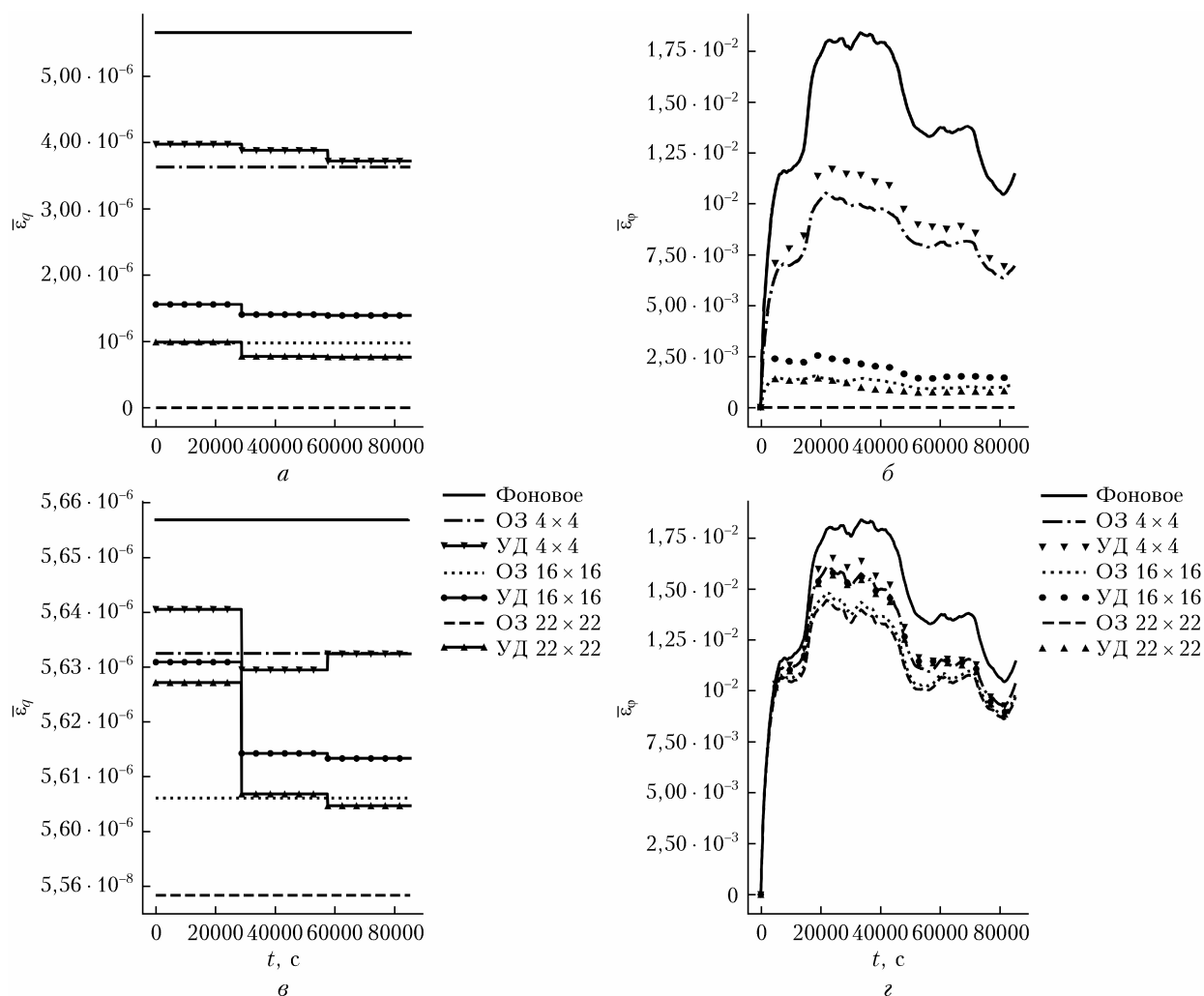


Рис. 3. Зависимость от модельного времени абсолютной ошибки восстановления источников NO (r_{NO}) (а, в) и динамики полей концентраций (ϕ_{NO}) (б, г) алгоритмом усвоения данных с окном усвоения 8 ч и решения обратной задачи для различных значений $\theta_{\text{Snapshot}}^{(x)} \times \theta_{\text{Snapshot}}^{(y)}$ с ограничением по вертикали (а, б) и без него (в, г); сплошная линия (Фоновое) соответствует решению без использования методов обратного моделирования $\phi[\mathbf{q}^{(0)}]$ (с нулевым источником)

Использование в алгоритме операторов чувствительности позволяет рассматривать данный алгоритм усвоения, следуя [19], как основу для разработки гибридного алгоритма усвоения данных, включающего элементы машинного обучения для уточнения как результатов обратного моделирования, так и используемых моделей.

Заключение

Таким образом, можно заключить, что подход на основе операторов чувствительности и ансамблей решений сопряженных уравнений позволяет решать обратные задачи и задачи усвоения данных для трехмерных моделей адвекции–диффузии–реакции, возникающих в различных областях, в частности при оценке и прогнозировании качества воздуха.

В проведенных численных экспериментах для регионального сценария алгоритм усвоения по данным интегральных измерений концентрации при-

меси по вертикали при неизвестном источнике выбросов позволил уточнить функцию состояния модели на 15%. При дополнительном ограничении области поиска по вертикали алгоритм позволил уточнить функцию состояния модели на 93% и неизвестную функцию источников на 85%. При решении обратной задачи, когда данные измерений на всем интервале использовались при восстановлении источника, были получены результаты, превосходящие по точности результаты усвоения, однако их получение потребовало почти в 3,5 раза больше времени.

Финансирование. Разработка алгоритма усвоения данных и решения обратных задач для трехмерных моделей выполнена в рамках госзадания ИВМиМГ СО РАН FWNM-2022-0003, в части конфигурирования региональных моделей гидротермодинамики атмосферы и задания региональных сценариев обратного моделирования – при поддержке РНФ (грант № 23-77-30008).

Список литературы

1. Grell G.A., Peckham S., Schmitz R., McKeen S., Frost G., Skamarock W., Eder B. Fully coupled chemistry within the WRF model // *Atmos. Environ.* 2005. V. 39, N 37. P. 6957–6975. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2005.04.027.
2. Skamarock W.C., Klemp J.B., Dudhia J., Gill D.O., Barker D.M., Duda M.G., Huang X.-Y., Wang W., Powers J.G. A Description of the advanced research WRF Version 4. figshare // *J. Contrib.* 2019. DOI: 10.6084/m9.figshare.7369994.v4.
3. Knote C., Brunner D., Vogel H., Allan J., Asmi A., Aijälä M., Carbone S., Gon H., Jimenez J., Kiendler-Scharr A., Mohr C., Poulain L., Prévôt A., Świątlicki E., Vogel B. Towards an online-coupled chemistry-climate model: Evaluation of trace gases and aerosols in COSMO-ART // *Geosci. Model Develop.* 2011. V. 4, N 4. P. 1077–1102. DOI: 10.5194/gmd-4-1077-2011.
4. Baklanov A., Korsholm U., Mahura A., Petersen C., Grosset A. ENVIRO-HIRLAM: On-line coupled modelling of urban meteorology and air pollution // *Adv. Sci. Res.* 2008. V. 2, N 1. P. 41–46.
5. Bocquet M., Elbern H., Eskes H., Hirtl M., Zaborkar R., Carmichael G.R., Flemming J., Inness A., Pagowski M., Prez Camano J.L., Saide P.E., San Jose R., Sofiev M., Vira J., Baklanov A., Carnevale C., Grell G., Seigneur C. Data assimilation in atmospheric chemistry models: Current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 2014. V. 14, N 23. P. 32233–32323. DOI: 10.5194/acpd-14-32233-2014.
6. Carrasi A., Bocquet M., Bertino L., Evensen G. Data assimilation in the geosciences: An overview of methods, issues, and perspectives // *WIREs.* 2018. V. 9, N 5. P. e535. DOI: 10.1002/wcc.535.
7. Penenko V.V., Obraztsov N.N. A variational initialization method for the fields of the meteorological elements // *Soviet Meteorol. Hydrol.* 1976. V. 11. P. 3–16.
8. Dimet F.-X.L., Talagrand O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: Theoretical aspects // *Tellus.* 1986. V. 38A. P. 97–110. DOI: 10.3402/tellusa.v38i2.11706.
9. Elbern H., Strunk A., Schmidt H., Talagrand O. Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion // *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 2007. V. 7, N 1. P. 1725–1783. DOI: 10.5194/acpd-7-1725-2007.
10. Carmichael G.R., Sandu A., Chai T., Daescu D.N., Constantinescu E.M., Tang Y. Predicting air quality: Improvements through advanced methods to integrate models and measurements // *J. Comput. Phys.* 2008. V. 227, N 7. P. 3540–3571. DOI: 10.1016/j.jcp.2007.02.024.
11. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 319 с.
12. Errico R.M. What is an adjoint model? // *Bull. Am. Meteorol. Soc.* 1997. V. 78, N 11. P. 2577–2591. DOI: 10.1175/1520-0477(1997)078<2577:WIAAM>2.0.CO;2.
13. Hakami A., Henze D.K., Seinfeld J.H., Singh K., Sandu A., Kim S., Byun D., Li Q. The adjoint of CMAQ // *Environ. Sci. Technol.* 2007. V. 41, N 22. P. 7807–7817. DOI: 10.1021/es070944p.
14. Penenko V.V., Penenko A.V., Tsvetova E.A., Gochakov A.V. Methods for studying the sensitivity of air quality models and inverse problems of geophysical hydrothermodynamics // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* 2019. V. 60, N 2. P. 392–399. DOI: 10.1134/S0021894419020202.
15. Penenko A. Convergence analysis of the adjoint ensemble method in inverse source problems for advection-diffusion-reaction models with image-type measurements // *Inverse Probl. Imaging.* 2020. V. 14, N 5. P. 757–782. DOI: 10.13140/RG.2.2.26550.14409.
16. Penenko A., Penenko V., Tsvetova E., Gochakov A., Pyanova E., Konopleva V. Sensitivity operator framework for analyzing heterogeneous air quality monitoring systems // *Atmosphere.* 2021. V. 12, N 12. P. 16971. DOI: 10.3390/atmos12121697.
17. Penenko A., Rusin E. Parallel implementation of a sensitivity operator-based source identification algorithm for distributed memory computers // *Mathematics.* 2022. V. 10, N 23. P. 45221. DOI: 10.3390/math10234522.
18. Марчук Г.И. О постановке некоторых обратных задач // Доклады АН СССР. 1964. № 3. С. 503–506.
19. Penenko A., Emelyanov M., Rusin E., Tsybenova E., Shablyko V. Hybrid deep learning and sensitivity operator-based algorithm for identification of localized emission sources // *Mathematics.* 2023. V. 12, N 1. P. 781. DOI: 10.1109/OPCS59592.2023.10275758.
20. Penenko A.V. Algorithms for the inverse modelling of transport and transformation of atmospheric pollutants // *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.* 2018. V. 211. P. 012052-1–012052-8. DOI: 10.1088/1755-1315/211/1/012052.
21. Penenko A.V., Rusin E.V., Penenko V.V. Emission sources identification scenario for a three-dimensional atmospheric transport and transformation model // *Proc. SPIE / O.A. Romanovskii (ed.).* 2023. V. 1278068. DOI: 10.1117/12.2690844.
22. Markakis K., Valari M., Perrussel O., Sanchez O., Honore C. Climate-forced air-quality modeling at the urban scale: Sensitivity to model resolution, emissions and meteorology // *Atmos. Chem. Phys.* 2015. V. 15, N 13. P. 7703–7723. DOI: 10.5194/acp-15-7703-2015.
23. Holnicki P., Nahorski Z. Emission data uncertainty in urban air quality modeling – case study // *Environ. Model. Assess.* 2015. V. 20, N 6. P. 583–597. DOI: 10.1007/s10666-015-9445-7.
24. Hong S.-Y., Dudhia J., Chen S.-H. A Revised approach to ice microphysical processes for the bulk parameterization of clouds and precipitation // *Mon. Weather Rev. Am. Meteorol. Soc.* 2004. V. 132, N 1. P. 103–120. DOI: 10.1175/1520-0493(2004)132<0103:ARATIM>2.0.CO;2.
25. Mlawer E.J., Taubman S.J., Brown P., Iacono M., Clough S. Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres: RRTM, a validated correlated-*k* model for the longwave // *J. Geophys. Res.: Atmos.* 1997. V. 102, N D14. P. 16663–16682. DOI: 10.1029/97JD00237.
26. Dudhia J. Numerical study of convection observed during the winter monsoon experiment using a mesoscale two-dimensional model // *J. Atmos. Sci. Am. Meteorol. Soc.* 1989. V. 46, N 20. P. 3077–3107. DOI: 10.1175/1520-0469(1989)046<3077:NSOCOD>2.0.CO;2.
27. Hong S.-Y., Noh Y., Dudhia J. A new vertical diffusion package with an explicit treatment of entrainment processes // *Mon. Weather Rev. Am. Meteorol. Soc.* 2006. V. 134, N 9. P. 2318–2341. DOI: 10.1175/MWR3199.1.
28. Beljaars A.C.M. The parametrization of surface fluxes in large-scale models under free convection // *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 1995. V. 121, N 522. P. 255–270.
29. Chen F., Dudhia J. Coupling an advanced land surface – hydrology model with the Penn state – NCAR MM5 modeling system. Part I: Model implementation and sensitivity // *Mon. Weather Rev. Am. Meteorol. Soc.* 2001. V. 129, N 4. P. 569–585. DOI: 10.1175/1520-0493(2001)129<0569:CAALSH>2.0.CO;2.
30. Антохин П.Н., Гочаков А.В., Колкер А.Б., Пененко А.В. Сравнение результатов расчетов химико-транспортной модели WRF-Chem с данными самолетных

измерений в г. Норильск // Оптика атмосф. и океана. 2018. Т. 31, № 4. С. 282–287. DOI: 10.15372/AOO20180406; *Antokhin P.N., Gochakov A.V., Kolker A.B., Penenko A.V.* Comparison of WRF-Chem chemical transport model calculations with aircraft measurements in Norilsk // Atmos. Ocean. Opt. 2018. V. 31, N 4. P. 372–380.

31. *National Centers for Environmental Prediction / National Weather Service/NOAA/U.S. Department of Commerce.* 2000, updated daily. NCEP FNL Operational Model Global Tropospheric Analyses, continuing from July 1999. Research Data Archive at the National Center for Atmospheric Research, Computational and Information Systems Laboratory. DOI: 10.5065/D6M043C6.

A.V. Penenko, A.V. Gochakov, P.N. Antokhin. **Data assimilation algorithm based on sensitivity operator for a three-dimensional atmospheric transport and transformation model.**

Three-dimensional transport and transformation models make it possible to take into account the vertical heterogeneity of atmospheric processes. However, their use requires setting a large number of parameters and significant computing resources, especially when solving inverse and data assimilation problems. A new data assimilation algorithm for a three-dimensional transport and transformation model with unknown emission sources is presented, which uses an approach based on sensitivity operators and ensembles of solutions of adjoint equations implemented in the IMDAF inverse modeling system for distributed memory computers. When tested in a realistic Baikal region scenario, the algorithm enabled, based on the data of integrated vertical measurements simulating remote sensing data, reducing the error in the concentration field by 15%. With the given vertical level of the source location, the errors in the concentration field and in the source were reduced by 93% and 85%, respectively.