

МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

УДК 519.688

Коррекция мощности модельных выбросов антропогенных источников атмосферного загрязнения на основе данных измерений и сопряженных задач

П.Н. Антохин^{✉1,2}, А.В. Пененко^{2,3}, М.Ю. Аршинов¹,
Б.Д. Белан¹, А.В. Гочаков^{4*}

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

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

³Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
630090, г. Новосибирск, ул. Академика Лаврентьева, 6

⁴Сибирский региональный научно-исследовательский гидрометеорологический институт
630099, г. Новосибирск, ул. Советская, 30

Поступила в редакцию 01.11.2024;

после доработки 10.01.2025;

принята к печати 14.01.2025

Прогнозирование уровня загрязнения воздуха газовыми и аэрозольными компонентами в городах приобретает все большую значимость из-за их серьезного негативного воздействия на здоровье населения и растущих экологических рисков. Представлен подход к оценке и коррекции мощности выбросов антропогенных источников загрязнения атмосферы на основе прямого и обратного моделирования. В качестве инструмента прямого моделирования использовалась модель WRF-Chem, а обратного – разрабатываемая авторами система IMDAF. Результаты прямого моделирования обеспечили данные о метеорологических полях и распределении примесей, необходимые для решения сопряженных задач. Метод сопряженных задач позволил вычислить корректирующий коэффициент, определяющий, насколько необходимо изменить мощность источников, попавших в зону чувствительности, для достижения наилучшего согласия с измерениями. Предложенный подход может быть использован для улучшения прогноза качества воздуха, уточнения инвентаризаций антропогенных выбросов и разработки стратегий снижения экологических рисков в глобальном и региональном масштабах.

Ключевые слова: численное моделирование, обратное моделирование, сопряженная задача, источники выбросов; numerical modeling, inverse modeling, adjoint problem, emission source.

Введение

Задача прогнозирования уровня загрязнения воздуха в городах газовыми и аэрозольными компонентами является актуальной в настоящее время в связи с их негативным влиянием на здоровье человека [1]. Наиболее значимо это проявляется при неблагоприятных погодных условиях, таких как волны жары или холода. Для прогнозирования качества воздуха активно используются глобальные и мезомасштабные химико-транспортные модели (ХТМ) [2, 3]. Качественный прогноз уровня загрязнения атмосферы требует актуальных данных

о выбросах газовых и аэрозольных компонентов. В настоящее время для задания источников эмиссий активно применяются как глобальные базы данных, например Emissions Database for Global Atmospheric Research (EDGAR) [4], так и региональные, такие как инвентаризация выбросов, разработанная Netherlands Organization for Applied Scientific Research (TNO) [5]. Однако эти базы обладают сравнительно низким пространственным разрешением ($0,1^\circ$) и ограниченной временной актуальностью. Кроме того, в них возможны значительные погрешности при оценке выбросов [6], что может приводить к отклонениям прогнозов загрязнения от реальных данных измерений.

Для улучшения согласия результатов моделирования с данными измерений встает задача уточнения источников выбросов. Для этого существуют два подхода: «снизу вверх» (bottom-up) и «сверху вниз» (top-down). Первый направлен на уточнение

* Павел Николаевич Антохин (arn@iao.ru); Алексей Владимирович Пененко (aleks@ommgp.sccc.ru); Михаил Юрьевич Аршинов (michael@iao.ru); Борис Денисович Белан (bbd@iao.ru); Александр Владимирович Гочаков (gochakov@sibnigmi.ru).

инвентаризации эмиссий с помощью данных об активности населения, выбросах предприятий, статистических данных о потребляемых энергетических ресурсах и различных коэффициентов, описывающих вклад и временную динамику источника эмиссий. Второй подход использует для инвентаризации источников эмиссий данные измерений загрязняющих веществ, полученные на измерительных станциях, с помощью мобильных лабораторий и дистанционного зондирования. В настоящее время существует много работ, в которых применяется подход «снизу вверх», например [4, 7]. Однако он сопряжен с рядом проблем, связанных с большими неточностями в имеющихся статистических данных об источниках выбросов, коэффициентах факторов эмиссий и их высокой пространственно-временной изменчивостью. Также стоит отметить наличие временной задержки в публикации статистических данных примерно в один–два года. Учитывая вышесказанное, подход «сверху вниз» является более предпочтительным, поскольку позволяет использовать обратное моделирование для уточнения источников эмиссий и приближения результатов моделирования к данным измерений.

К настоящему времени было предложено большое количество подходов для уточнения пространственно-временного распределения источников выбросов на основе обратного моделирования [8]. Развитие методов обратного моделирования в ХТМ привело к тому, что подход «сверху вниз» стал одним из основных при решении подобных задач [9, 10]. В основном он используется для уточнения источников эмиссий пассивных трассеров или малых газовых компонент атмосферы, которые можно к ним отнести (SO_2 , CO , CO_2 , CH_4 , NO_x), и включает в себя следующие методы: баланса массы [11–13], обратных траекторий [14], сопряженной задачи [15–20], основанный на теории байесовых оценок [21, 22], ансамблевый фильтр Калмана [23–25], четырехмерный вариационный подход (4DVAR) [26–28], метод адаптивной коррекции (nudging) [29].

Цель настоящей работы – создание и апробация метода уточнения мощности источников эмиссий на основе подхода «сверху вниз», основанного на решении сопряженной задачи для двумерной модели адвекции-диффузии IMDAF (Inverse Modeling and Data Assimilation Framework). Он является упрощенной модификацией подхода на основе оператора чувствительности и ансамблей решений сопряженных уравнений [19, 20].

Материалы и методы

В предложенном подходе мы использовали две модели: WRF-Chem v.4.2 [3] (далее в тексте версию модели опустим) для прямого моделирования изменения концентраций загрязняющих веществ и вычислительно более эффективную за счет упрощений в описании процессов переноса примесей в атмосфере модель IMDAF для корректировки данных об источниках эмиссий. Выбор такой схемы обу-

словлен необходимостью сокращения вычислительных затрат, так как использование детальной модели в задачах обратного моделирования, требующих многократного решения прямых и сопряженных задач, может быть очень ресурсозатратным.

Качественно сравним описываемый метод с популярными подходами к обратному моделированию 3DVAR и 4DVAR. В классических методах 4DAVR (со слабыми ограничениями) задача минимизации целевого функционала обычно решается итеративно. В разрабатываемом нами подходе используются выражения, непосредственно связывающие мощности источников с измерениями, поэтому алгоритм коррекции является безитерационным. Вместо последовательного решения одной прямой и одной сопряженной задачи на каждой итерации 4DVAR данный алгоритм требует решения сопряженных задач для каждого рассматриваемого элемента данных измерений. Эти вычисления независимы друг от друга и могут быть эффективно распараллелены. Классические алгоритмы типа 3DVAR не строят оценок функции источников, а уточняют функцию состояния непосредственно, поэтому результат их работы затруднительно использовать в качестве входных параметров источников для модели WRF-Chem.

Постановка задачи обратного моделирования

Рассмотрим пространственно-временную область $\bar{W}_T = \bar{W} \times [0, T]$, где \bar{W} – трехмерная пространственная область. В предлагаемом подходе используется комбинация двух моделей. Для решения прямых задач применяется WRF-Chem – нелинейная интегрированная модель, которая обеспечивает высокую точность, но требует значительных вычислительных ресурсов при уточнении источников на основе измерений. Обозначим распределение полей концентраций, полученное с помощью модели WRF-Chem, как $\phi = \bar{\phi}[\bar{r}]$, где $\bar{r}(\mathbf{x}, t)$ – функция источников, распределенных в \bar{W}_T . Кроме того, определен оператор измерений $\bar{H}_m(\phi)$, который преобразует распределение концентраций в измеряемые значения:

$$\bar{H}_m(\phi) = \langle \bar{h}_m, \phi \rangle_{\bar{W}_T}, \quad (1)$$

где \bar{h}_m – весовая функция измерения; $\langle \rangle$ – скалярное произведение. Для любых $a(x, t)$ и $b(x, t)$ скалярное произведение определено как

$$\langle a, b \rangle_{\bar{W}_T} = \int_0^T \int_{\bar{W}} a(x, t) b(x, t) dx dt. \quad (2)$$

Например, в случае точечного измерения, проведенного в точке с координатами $(x_m, y_m, z_m, t_m) \in \bar{W}_T$, весовая функция измерения будет иметь вид

$$\bar{h}_m(x, y, z, t) = \delta(x - x_m) \delta(y - y_m) \delta(z - z_m) \delta(t - t_m), \quad (3)$$

где δ – дельта-функция.

Пусть в нашем распоряжении имеется M измерений в точках $(x_m, y_m, z_m, t_m) \in \bar{W}_T$ со значениями

$$I_m = \langle \bar{h}_m, \varphi \rangle_{\bar{W}_T} = \langle \delta(x - x_m) \delta(y - y_m) \delta(z - z_m) \delta(t - t_m), \varphi \rangle. \quad (4)$$

Будем предполагать, что источники могут быть только наземными:

$$\bar{r}(x, y, z, t) = \begin{cases} 0 & z > 0; \\ r(x, y, z, t) & z = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Для уточнения величин источников рассмотрим двумерную по пространству модель в области $\Omega_T = \Omega \times [0, T]$, где Ω — двумерная пространственная область. В этой области определим математическую модель типа адвекции-диффузии пассивной примеси, которая описывает перенос примесей в атмосфере:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \nabla(\text{diag}(\mu) \nabla \varphi - \mathbf{u} \varphi) = f + r, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega_T; \quad (6)$$

$$\mathbf{n}(\text{diag}(\mu) \nabla \varphi) + \beta \varphi = \alpha, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{\text{out}} \subseteq \delta \Omega_T; \quad (7)$$

$$\varphi = \alpha, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{\text{in}} \subseteq \delta \Omega_T; \quad (8)$$

$$\varphi = \varphi^0, \quad \mathbf{x} = \Omega, \quad t = 0, \quad (9)$$

где $\varphi(\mathbf{x}, t)$ — функция состояния, обозначающая концентрацию рассматриваемых веществ в точке; $(\mathbf{x}, t) \in \Omega_T$, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^2$ — вектор скорости переноса; $\mu(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^2$ — вектор коэффициентов диффузии; $\text{diag}(\mu)$ — матрица с вектором \mathbf{x} на диагонали; r — неизвестная функция источников; α — параметр краевых условий; Γ^{out} и Γ^{in} — части границы области, где скорость переноса нулевая или направлена из области/внутрь области. Задаются априорные (фоновые) значения источников f и начальных данных φ^0 . Задачу определения функций φ из (1)–(4) по известным r и V будем называть прямой. Обозначим ее решение через $\varphi[r]$. Тогда для любых $r^{(2)}, r^{(1)}$ верно следующее соотношение чувствительности [30]:

$$\langle S[h], r^{(2)} - r^{(1)} \rangle = \langle h, \varphi[r^{(2)}] - \varphi[r^{(1)}] \rangle, \quad (10)$$

где функции чувствительности $S[h]$ вычисляются с помощью решения сопряженной задачи с правой частью h . Оператор измерений зададим аналогично (4) в виде

$$H_m(\varphi) = \langle h_m, \varphi \rangle_{\Omega_T}, \quad (11)$$

где h_m — весовая функция измерения;

$$\langle a, b \rangle_{\Omega_T} = \int_0^T \int_{\Omega} a_l(x, t) b_l(x, t) dx dt. \quad (12)$$

В случае измерения, проведенного в точке с координатами $(x_m, y_m, t_m) \in \Omega_T$, весовая функция измерения будет иметь вид

$$h_m(x, y, t) = \delta(x - x_m) \delta(y - y_m) \delta(t - t_m). \quad (13)$$

Рассмотрим источник как набор точечных постоянных по времени источников:

$$r = \sum_{s=a}^R r_{(s)} \delta(x - x_{(s)}) \delta(y - y_{(s)}), \quad r_{(s)} > 0, \quad (x_{(s)}, y_{(s)}) \in \Omega, \quad (14)$$

где $x_{(s)}, y_{(s)}$ — координаты s -го точечного источника; $r_{(s)}$ — его мощность. Предположим, что коррекция требуется только для мощностей $\{r_{(s)}\}$. Тогда

$$\sum_{s=1}^R (r_{(s)}^{(2)} - r_{(s)}^{(1)}) \langle S[h], \delta(x - x_{(s)}) \delta(y - y_{(s)}) \rangle = \langle h, \varphi[r^{(2)}] - \varphi[r^{(1)}] \rangle. \quad (15)$$

Пусть в нашем распоряжении имеется M измерений в точках $(x_m, y_m, t_m) \in \Omega_T$ со значениями I_m . Тогда мы имеем M тождеств:

$$\sum_{s=1}^R (r_{(s)}^{(2)} - r_{(s)}^{(1)}) \langle S[h], \delta(x - x_{(s)}) \delta(y - y_{(s)}) \rangle = \langle h_m, \varphi[r^{(2)}] \rangle - \langle h_m, \varphi[r^{(1)}] \rangle. \quad (16)$$

Если предположить, что

$$I_m = \langle h_m, \varphi[r^{(2)}] \rangle_{\Omega_T}, \quad (17)$$

то получаем систему уравнений

$$\sum_{s=1}^R (r_{(s)}^{(2)} - r_{(s)}^{(1)}) \langle S[h_m], \delta(x - x_{(s)}) \delta(y - y_{(s)}) \rangle = I_m - \langle h_m, \varphi[r^{(1)}] \rangle. \quad (18)$$

Если, например, предположить, что все мощности одинаково занижены или завышены, то получаем коэффициент коррекции

$$r_{(s)}^{(2)} = \rho r_{(s)}^{(1)}, \quad (19)$$

$$(\rho - 1) \sum_{s=1}^R r_{(s)}^{(1)} \langle S[h_m], \delta(x - x_{(s)}) \delta(y - y_{(s)}) \rangle = I_m - \langle h_m, \varphi[r^{(1)}] \rangle, \quad (20)$$

$$\rho = 1 + \frac{I_m - \langle h_m, \varphi[r^{(1)}] \rangle}{\sum_{s=1}^R r_{(s)}^{(1)} \langle S[h_m], \delta(x - x_{(s)}) \delta(y - y_{(s)}) \rangle}. \quad (21)$$

Подготовка данных для численного эксперимента

Для проведения численных экспериментов необходимо задать распределение метеорологических параметров (скорость и направление ветра, коэффициент турбулентности), а также начальные и гранич-

ные условия для газовых компонентов. Эти данные были получены с использованием прямого моделирования в модели WRF-Chem с 1 по 7.09.2020 г. Расчеты были проведены для двух доменов в проекции Ламберта. Первый грубый домен $95 \times 100 \times 21$ (число ячеек) ($50,13-70,5^\circ$ с.ш.; $16,7-70,8^\circ$ в.д.) с разрешением 27 км. Второй домен $145 \times 106 \times 21$ с разрешением 9 км ($54,1-65,8^\circ$ с.ш.; $24,4-44,5^\circ$ в.д.).

В расчетах были использованы следующие параметризации: микрофизика — Morrison; длинноволновая радиация — RRTMG; коротковолновая радиация — RRTMG; модель поверхности — Noah; пограничный планетарный слой — Mellor-Yamada-Janjic; облачность — Grell 3D.

Тестирование было проведено с помощью модели WRF-Chem в режиме переноса пассивного трассера. В качестве трассера использовался диоксид серы (SO_2) — важный индикатор атмосферных процессов в Арктике, отслеживающий перенос загрязнителей и их источники. Его участие в образовании сульфатных аэрозолей влияет на климат и радиационный баланс, а кислотные осадки угрожают экосистемам. Использование SO_2 как трассера в моделях помогает изучать динамику переноса и химические трансформации составляющих атмосферы, что делает его важным компонентом климатических и экологических исследований.

Для запуска модели использовались метеорологические данные анализа FNL (Final Operational Global Analysis Data) [31] с разрешением $0,25 \times 0,25^\circ$. Начальные и граничные условия для химического состава воздуха устанавливались нулевыми. Антропогенные эмиссии SO_2 были заданы на первых пяти высотных уровнях от поверхности с коэффициентами 0,05; 0,6; 0,2; 0,15; 0,05 на основе базы EDGAR v.4.3.2. В районе проведения исследований первым пяти модельным уровням соответствуют высоты 37, 110, 208, 322 и 440 м относительно поверхности.

В качестве измерительного пункта для оценки качества моделирования и сопоставления результатов был выбран г. Архангельск ($64,60^\circ$ с.ш.; $40,73^\circ$ в.д.). Поскольку в работе использовалась двумерная версия модели IMDAF, для формирования входных данных потребовалось выбрать оптимальный диапазон усреднения по высоте. Он определяется специфическими требованиями задачи и может варьироваться в широких пределах, учитывая особенности турбулентного перемешивания и распространения загрязняющих веществ. Мы протестировали несколько диапазонов высот, для каждого из которых метеорологические параметры и газовый состав были усреднены. Это позволило учесть особенности распределения метеорологических параметров и концентрации загрязняющих веществ, сохраняя при этом вычислительную эффективность модели.

Мощность и местоположение источников выбросов в модели IMDAF задавались тем же набором источников, что и для прямого моделирования в модели WRF-Chem. Это обеспечило согласован-

ность между прямым и обратным моделированием и позволило эффективно использовать полученные данные для уточнения выбросов.

На основе результатов расчетов модели WRF-Chem без изменения мощности источников загрязнений были сформированы данные виртуальных измерений: пространственные и временные ряды. Пространственные измерения включали квадрат 3×3 узла сетки с центральным узлом, ближайшим к координатам Архангельска ($64,60^\circ$ с.ш.; $40,73^\circ$ в.д.). Временной ряд для этой же точки включал 10 измерений с шагом 1 ч начиная с 07:00 4.09.2020 г. Данные были сформированы для диапазонов высот усреднения 0–100, 0–250, 0–500 и 0–1000 м.

Результаты и обсуждение

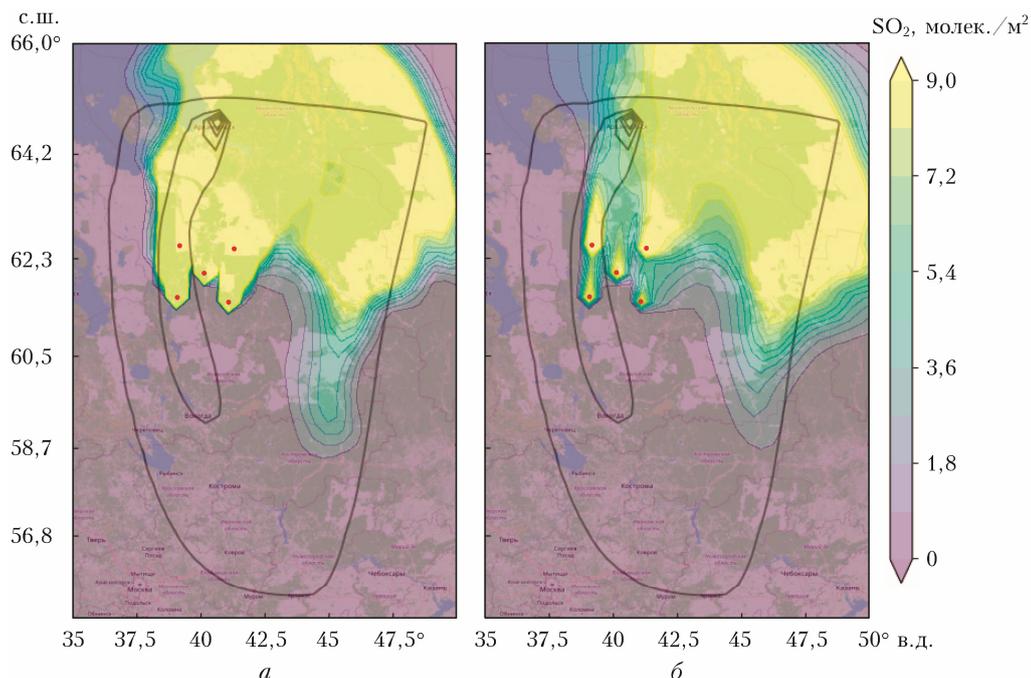
Единый источник загрязнения

Первая серия численных экспериментов состояла в уточнении мощности единственного источника выбросов, попавшего в зону чувствительности нашего метода. Расчет был произведен на основном и вложенном доменах для двух диапазонов высот усреднения: 0–250 и 0–500 м.

Сопоставление результатов прямого моделирования, выполненного с упрощенной двумерной моделью IMDAF, с данными модели WRF-Chem показало их хорошее согласие (рисунок). На рисунке представлены расчеты, выполненные 4.09.2020 г. в 09:00 СГВ. Для наглядности рисунков ограничим район исследования, в котором находится источник и точка измерений, координатами $61-65^\circ$ с.ш., $36-43^\circ$ в.д.

Несмотря на наличие некоторых расхождений (рисунок), модель успешно воспроизводит как основные пространственные, так и временные характеристики переноса примеси, что говорит о ее адекватности для задач данного типа. Однако при переходе к двумерной модели неизбежны определенные упрощения, связанные с усреднением метеорологических параметров, что приводит к частичной потере точности в воспроизведении локальных процессов и вертикального обмена.

Убедившись в корректности решения прямой задачи, мы провели анализ результатов численного эксперимента. Итоги оценки коэффициента коррекции мощности источника для проведенного численного эксперимента представлены в табл. 1 для площадных данных и временного ряда (формирование этих рядов было описано выше). Первый столбец показывает, насколько была изменена мощность источника относительно первоначальной заданной мощности. Значения в ячейках таблицы показывают коэффициент, на который необходимо умножить используемую мощность источника, чтобы минимизировать расхождение с наблюдаемыми данными. Если коэффициент равен $2,1 \pm 0,2$ для основного домена и высоты 0–250 м (случай $0,5r(x, y)$), это означает, что мощность источника нужно увеличить в 2,1 раза, чтобы добиться совпадения с результатами измерений.



Результаты расчетов концентраций SO_2 со слоем усреднения 0–250 м для основного домена по моделям WRF-Chem (а) и IMDAF (б); контуром нанесена зона чувствительности; расположение источников показано красными точками (см. цветной рисунок на сайте <http://iao.ru/ru/content/vol.38-2025/iss.3>)

Таблица 1

Коэффициенты восстановления мощности единичного источника загрязнения

Мощность источника	Высота усреднения, м			
	Основной домен		Вложенный домен	
	0–250	0–500	0–250	0–500
$0,5r(x, y)$	$2,11 \pm 0,20$ $2,01 \pm 0,11$	$2,05 \pm 0,74$ $2,10 \pm 0,08$	$2,42 \pm 0,48$ $2,01 \pm 0,28$	$2,10 \pm 0,45$ $2,10 \pm 0,36$
$r(x, y)$	$1,02 \pm 0,10$ $1,01 \pm 0,05$	$1,00 \pm 0,374$ $1,02 \pm 0,04$	$1,20 \pm 0,24$ $1,01 \pm 0,14$	$1,12 \pm 0,22$ $1,13 \pm 0,18$
$5r(x, y)$	$0,22 \pm 0,02$ $0,20 \pm 0,01$	$0,20 \pm 0,07$ $0,21 \pm 0,01$	$0,20 \pm 0,05$ $0,21 \pm 0,03$	$0,20 \pm 0,04$ $0,20 \pm 0,04$

Примечание. Здесь и далее в таблицах прямым шрифтом представлены значения для пространственно распределенных данных, курсивом – для временного ряда.

В случае, когда мощность источника не была изменена, модель IMDAF показала хорошее согласие с наблюдениями как для основного, так и для вложенного доменов. Коэффициент коррекции был равен единице. Незначительные его отличия от единицы наблюдались для вложенного домена, однако они находились в пределах среднеквадратичного отклонения (СКО). Расчеты на основном домене показали, что при уменьшении мощности источника до 50% от исходной наблюдается пропорциональный рост коэффициента коррекции с использованием пространственных данных до 2,11 и 2,01 в диапазонах высот 0–250 и 0–500 м соответственно. Для вложенного домена коэффициенты получились несколько выше и составили 2,42 и 2,01 соответственно. Для временных рядов наблюдалось аналогичное поведение ρ_m , однако СКО было ниже. При увеличении мощности в пять раз относительно ис-

ходной ρ_m определялся значительно лучше, о чем свидетельствует довольно низкое СКО. В результате проведенных численных экспериментов предложенный подход продемонстрировал возможность коррекции мощности для одного источника на основе результатов обратного моделирования с использованием модели IMDAF.

Несколько точечных источников загрязнения

Результаты расчета коэффициента коррекции для нескольких источников выбросов (табл. 2) показывают, что модель IMDAF, как и для одного источника, адекватно оценила изменения. После увеличения числа источников среднее СКО снизилось. Например, в случае $0,5r(x, y)$ СКО пространственных данных уменьшилось с 0,74 (один источник) до 0,10 (несколько источников) для основного домена при высоте усреднения 0–500 м. В целом снижение СКО составило от 2 до 10, а для вложенного домена – до 4 раз.

Таблица 2

Коэффициенты восстановления мощности нескольких источников загрязнения

Мощность источника	Высота усреднения, м			
	Основной домен		Вложенный домен	
	0–250	0–500	0–250	0–500
$0,5r(x, y)$	$2,10 \pm 0,05$ $2,01 \pm 0,04$	$2,01 \pm 0,10$ $2,00 \pm 0,02$	$2,06 \pm 0,03$ $2,05 \pm 0,05$	$2,11 \pm 0,11$ $2,02 \pm 0,04$
$r(x, y)$	$1,01 \pm 0,03$ $1,02 \pm 0,02$	$1,02 \pm 0,04$ $1,01 \pm 0,01$	$1,03 \pm 0,01$ $1,02 \pm 0,02$	$1,10 \pm 0,06$ $1,01 \pm 0,02$
$5r(x, y)$	$0,21 \pm 0,01$ $0,20 \pm 0,01$	$0,20 \pm 0,01$ $0,20 \pm 0,01$	$0,21 \pm 0,00$ $0,20 \pm 0,01$	$0,20 \pm 0,01$ $0,20 \pm 0,01$

Оценка чувствительности метода коррекции мощности единичного источника к изменению высоты усреднения

Для проверки чувствительности метода коррекции мощности источника выбросов к высоте усреднения были выполнены расчеты для одного источника с нулевыми начальными и граничными условиями. Рассмотрены два слоя: 0–100 м, где возможна потеря информации из-за высоты перемешивания, и 0–1000 м, отражающий влияние фоновых концентраций. Результаты расчетов представлены в табл. 3.

Таблица 3

Чувствительность метода коррекции мощности единичного точечного источника к изменению высоты усреднения

Мощность источника	Высота усреднения, м			
	Основной домен		Вложенный домен	
	0–100	0–1000	0–100	0–1000
$0,5r(x, y)$	$1,90 \pm 99,96$	$1,81 \pm 0,10$	$0,50 \pm 301,48$	$2,53 \pm 0,39$
	$4,03 \pm 1,34$	$1,80 \pm 0,09$	$0,60 \pm 0,32$	$2,0 \pm 0,51$
$r(x, y)$	$1,00 \pm 49,98$	$0,90 \pm 0,05$	$0,32 \pm 150,74$	$1,20 \pm 0,19$
	$2,00 \pm 0,67$	$0,90 \pm 0,05$	$0,31 \pm 0,16$	$1,0 \pm 0,25$
$5r(x, y)$	$0,20 \pm 10,00$	$0,20 \pm 0,01$	$0,05 \pm 30,15$	$0,20 \pm 0,04$
	$0,40 \pm 0,13$	$0,20 \pm 0,01$	$0,06 \pm 0,03$	$0,20 \pm 0,05$

Из табл. 3 следует вывод, что при использовании малого диапазона усреднения 0–100 м резко возрастает ошибка оценки ρ_m , что подтверждается самим коэффициентом и его СКО. Однозначного закономерного влияния при переходе от основного домена к вложенному обнаружить не удалось. При использовании слоя 0–1000 м полученные оценки ρ_m для пространственных данных были довольно близки к заданным значениям и хорошо согласовывались с ранее полученными в табл. 1. Оценки ρ_m для временных данных продемонстрировали хорошее согласие с ранее полученными оценками для вложенного домена. Для основного домена оценки ρ_m были неудовлетворительными. Можно сделать вывод, что для получения корректной оценки ρ_m необходимо выбирать высоту слоя усреднения от 250 до 1000 м для пространственных данных и до 500 для временных рядов.

Оценка чувствительности метода коррекции мощности нескольких источников к изменению высоты усреднения

Результаты численных экспериментов для нескольких источников выбросов (табл. 4) показывают, что алгоритм успешно компенсирует потери информации, характерные для тонкого слоя усреднения, в сравнении с одним источником. Например, для основного домена при высоте 0–100 м коэффициент коррекции для временного ряда составил $3,01 \pm 0,72$ против $4,03 \pm 1,34$ для единичного источника. Во вложенном домене также наблюдаются значительные улучшения.

Таблица 4

Чувствительность метода коррекции мощности нескольких источников загрязнения к изменению высоты усреднения

Мощность источника	Высота усреднения, м			
	Основной домен		Вложенный домен	
	0–100	0–1000	0–100	0–1000
$0,5(x, y)$	$1,72 \pm 1,96$	$1,90 \pm 0,23$	$1,11 \pm 1,05$	$1,72 \pm 0,23$
	$3,01 \pm 0,72$	$2,00 \pm 0,08$	$2,25 \pm 1,94$	$2,00 \pm 0,16$
$r(x, y)$	$0,86 \pm 0,98$	$0,95 \pm 0,12$	$0,56 \pm 0,52$	$0,86 \pm 0,11$
	$1,50 \pm 0,36$	$1,00 \pm 0,04$	$1,13 \pm 0,97$	$1,00 \pm 0,08$
$5r(x, y)$	$0,17 \pm 0,20$	$0,19 \pm 0,02$	$0,11 \pm 0,10$	$0,17 \pm 0,02$
	$0,30 \pm 0,07$	$0,20 \pm 0,01$	$0,23 \pm 0,19$	$0,20 \pm 0,02$

Данные табл. 4 для слоя усреднения 0–1000 м показывают, что временные ряды дают более точные коэффициенты коррекции с меньшим СКО. Для единичного источника загрязнения наблюдается завышение коэффициента, а для нескольких источников – занижение. Например, для случая $5r(x, y)$ коэффициент составил $2,53 \pm 0,39$ для единичного и $1,72 \pm 0,23$ для нескольких источников.

Заключение

Выполненные расчеты на основе модельных данных показали, что предложенный нами подход с использованием коэффициента коррекции для мощности источников загрязнения позволяет довольно эффективно и обоснованно проводить процедуру уточнения мощности. Однако стоит отметить, что наш подход требует дополнительной доработки, направленной на учет динамики пограничного слоя атмосферы, влияния суточного и недельного хода мощности источников эмиссии, трансформации химических веществ, влияния осадков и точности задания метеорологических параметров. Все эти задачи планируется решить в дальнейших исследованиях.

Финансирование. Разработка алгоритмов усвоения данных и решения обратных задач для трехмерных моделей выполнена в рамках госзадания ИВМиМГ СО РАН FWNМ-2022-0003, конфигурирование региональных моделей гидротермодинамики атмосферы и задания региональных сценариев обратного моделирования – при поддержке РНФ (грант № 23-77-30008). Хранение и обработка полученных данных выполнены в рамках госзадания ИОА СО РАН.

Список литературы

1. Adams K., Greenbaum D.S., Shaikh R., van Erp A.M., Russell A.G. Particulate matter components, sources, and health: Systematic approaches to testing effects // J. Air Waste Manag. Ass. 2015. V. 65. P. 544–558. DOI: 10.1080/10962247.2014.1001884.
2. Mahura A., Baklanov A., Makkonen R., Boy M., Petäjä T., Lappalainen H.K., Nuterman R., Kerminen V.-M., Arnold S.R., Jochum M., Shvidenko A., Esau I., Sofiev M., Stohl A., Aalto T., Bai J., Chen C., Cheng Y., Drofa O., Huang M., Järvi L.,

- Kokkola H., Kouznetsov R., Li T., Malguzzi P., Monks S., Poulsen M.B., Noe S.M., Palamarchuk Y., Foreback B., Clusius P., Soya A., She J., Sørensen J.H., Spracklen D., Su H., Tonttila J., Wang S., Wang J., Wolf-Grosse T., Yu Y., Zhang Q., Zhang W., Zhang W., Zheng X., Li S., Li Y., Zhou P., Kulmala M. Towards seamless environmental prediction – development of Pan-Eurasian EXperiment (PEEX) modelling platform // *Big Earth Data*. 2024. V. 8. P. 189–230. DOI: 10.5194/gmd-11-4603-2018.
3. Grell G.A., Peckham S.E., Schmitz R., McKeen S.A., Frost G., Skamarock W.C., Eder B. Fully coupled “online” chemistry within the WRF model // *Atmos. Environ.* 2005. V. 39. P. 6957–6975. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2005.04.027.
 4. Crippa M., Guizzardi D., Pagani F., Schiavina M., Melchiorri M., Pisoni E., Graziosi F., Muntean M., Maes J., Dijkstra L., Damme M.V., Clarisse L., Coheur P. Insights into the spatial distribution of global, national, and subnational greenhouse gas emissions in the Emissions Database for Global Atmospheric Research (EDGAR v8.0) // *Earth Syst. Sci. Data*. 2024. V. 16. P. 2811–2830. DOI: 10.5194/essd-16-2811-2024.
 5. Kuenen J.J.P., Visschedijk A.J.H., Jozwicka M., Denier van der Gon H.A.C. TNO-MACC-II emission inventory; a multi-year (2003–2009) consistent high-resolution European emission inventory for air quality modelling // *Atmos. Chem. Phys.* 2014. V. 14. P. 10963–10976. DOI: 10.5194/acp-14-10963-2014.
 6. Шалыгина И.Ю., Кузнецова И.Н., Нахаев М.И., Борисов Д.В., Лезина Е.А. Эффективность коррекции эмиссий для расчетов химической транспортной модели CHIMERE в Московском регионе // *Оптика атмосф. и океана*. 2020. Т. 33, № 6. С. 441–447. DOI: 10.15372/AOO20200604.
 7. Liu L., Liu H., Geng G., Hong C., Liu F., Song Y., Tong D., Zheng B., Cui H., Man H., Zhang Q., He K. Anthropogenic emission inventories in China: A review // *Nat. Sci. Rev.* 2017. V. 4. P. 834–866. DOI: 10.1093/nsr/nwx150.
 8. Cheng X., Hao Z., Zang Z., Liu Z., Xu X., Wang S., Liu Y., Hu Y., Ma X. A new inverse modeling approach for emission sources based on the DDM-3D and 3DVAR techniques: An application to air quality forecasts in the Beijing–Tianjin–Hebei region // *Atmos. Chem. Phys.* 2021. V. 21. P. 13747–13761. DOI: 10.5194/acp-21-13747-2021.
 9. Enting I.G. *Inverse Problems in Atmospheric Constituent Transport*. Cambridge University Press, 2002. 392 p. DOI: 10.1017/CBO9780511535741.
 10. Sportisse B. A review of current issues in air pollution modeling and simulation // *Comput. Geosci.* 2007. V. 11. P. 159–181. DOI: 10.1007/s10596-006-9036-4.
 11. Martin R.V. Global inventory of nitrogen oxide emissions constrained by space-based observations of NO₂ columns // *J. Geophys. Res.* 2003. V. 108. DOI: 10.1029/2003jd003453.
 12. Wang Y., Chen X., Martin R.V., Streets D.G., Zhang Q., Fu T.-M. Seasonal variability of NO_x emissions over east China constrained by satellite observations: Implications for combustion and microbial sources // *J. Geophys. Res.* 2007. V. 112. DOI: 10.1029/2006jd007538.
 13. Yang Q., Wang Y.H., Zhao C., Liu Z., William I., Gustafson J., Shao M. NO_x emission reduction and its effects on ozone during the 2008 Olympic Games // *Environ. Sci. Technol.* 2011. V. 45. P. 6404–6410. DOI: 10.1021/es200675v.
 14. Manning A.J., O’Doherty S., Jones A.R., Simmonds P.G., Derwent R.G. Estimating UK methane and nitrous oxide emissions from 1990 to 2007 using an inversion modeling approach // *J. Geophys. Res.* 2011. V. 116. DOI: 10.1029/2010jd014763.
 15. Li F., Hu F., Zhu J. Solving the optimal layout problem of multiple industrial pollution sources using the adjoint method // *Sci. China: Earth Sci.* 2005. V. 35. P. 64–71.
 16. Koohkan M.R., Bocquet M., Roustan Y., Kim Y., Seigneur C. Estimation of volatile organic compound emissions for Europe using data assimilation // *Atmos. Chem. Phys.* 2013. V. 13. P. 5887–5905. DOI: 10.5194/acp-13-5887-2013.
 17. Zhang L., Shao J., Lu X., Zhao Y., Hu Y., Henze D.K., Liao H., Gong S., Zhang Q. Sources and processes affecting fine particulate matter pollution over North China: An adjoint analysis of the Beijing APEC period // *Sci. Technol.* 2016. V. 50. P. 8731–8740. DOI: 10.1021/acs.est.6b03010.
 18. Wang C., An X., Zhai S., Hou Q., Sun Z. Tracking sensitive source areas of different weather pollution types using GRAPES-CUACE adjoint model // *Atmos. Environ.* 2018. V. 175. P. 154–166. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2017.11.041.
 19. Penenko A. Convergence analysis of the adjoint ensemble method in inverse source problems for advection-diffusion-reaction models with image-type measurements // *Inverse Prob. Imaging*. 2020. V. 14. P. 757–782. DOI: 10.3934/ipi.2020035.
 20. Gochakov A.V., Penenko A.V., Antokhin P.N., Kolker A.B. Air pollution modelling in urban environment based on *a priori* and reconstructed data // *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.* 2018. V. 211. P. 12050. DOI: 10.1088/1755-1315/211/1/012050.
 21. Kopacz M., Jacob D.J., Henze D.K., Heald C.L., Streets D.G., Zhang Q. Comparison of adjoint and analytical Bayesian inversion methods for constraining Asian sources of carbon monoxide using satellite (MOPITT) measurements of CO columns // *J. Geophys. Res.* 2009. V. 114. DOI: 10.1029/2007jd009264.
 22. Lucas D.D., Simpson M., Cameron-Smith P., Baskett R.L. Bayesian inverse modeling of the atmospheric transport and emissions of a controlled tracer release from a nuclear power plant // *Atmos. Chem. Phys.* 2017. V. 17. P. 13521–13543. DOI: 10.5194/acp-17-13521-2017.
 23. Bocquet M., Elbern H., Eskes H., Hirtl M., Žabkar R., Carmichael G.R., Flemming J., Inness A., Pagowski M., Pérez Camaño 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.* 2015. V. 15. P. 5325–5358. DOI: 10.5194/acp-15-5325-2015.
 24. Chen D., Liu Z., Ban J., Chen M. The 2015 and 2016 wintertime air pollution in China: SO₂ emission changes derived from a WRF-Chem/EnKF coupled data assimilation system // *Atmos. Chem. Phys.* 2019. V. 19. P. 8619–8650. DOI: 10.5194/acp-19-8619-2019.
 25. Dai T., Cheng Y., Goto D., Li Y., Tang X., Shi G., Nakajima T. Revealing the sulfur dioxide emission reductions in China by assimilating surface observations in WRF-Chem // *Atmos. Chem. Phys.* 2021. V. 21. P. 4357–4379. DOI: 10.5194/acp-21-4357-2021.
 26. Elbern H., Strunk A., Schmidt H., Talagrand O. Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion // *Atmos. Chem. Phys.* 2007. V. 7. P. 3749–3769. DOI: 10.5194/acp-7-3749-2007.
 27. Niwa Y., Tomita H., Satoh M., Imasu R., Sawa Y., Tsuboi K., Matsueda H., Machida T., Sasakawa M.,

- Belan B., Saigusa N.* A 4D-Var inversion system based on the icosahedral grid model (NICAM-TM 4D-Var v1.0). Part 1: Offline forward and adjoint transport models // *Geosci. Model Develop.* 2017. V. 10. P. 1157–1174. DOI: 10.5194/gmd-10-1157-2017.
28. *Voshtani S., Ménard R., Walker T.W., Hakami A.* Use of assimilation analysis in 4D-Var source inversion: Observing System Simulation Experiments (OSSEs) with GOSAT methane and hemispheric CMAQ // *Atmosphere.* 2023. V. 14. P. 758. DOI: 10.3390/atmos14040758.
29. *Hu Y., Odman M.T., Russell A. G.* Top-down analysis of the elemental carbon emissions inventory in the United States by inverse modeling using Community Multiscale Air Quality model with Decoupled Direct Method (CMAQ-DDM) // *J. Geophys. Res.* 2009. V. 114. DOI: 10.1029/2009jd011987.
30. *Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 351 с.
31. *NCEP FNL Operational Model Global Tropospheric Analyses, continuing from July 1999.* DOI: 10.5065/D6M043C6 (last access: 12.05.2024).

***P.N. Antokhin, A.V. Penenko, M.Yu. Arshinov, B.D. Belan, A.V. Gochakov.* Adjustment of the power of model emissions of anthropogenic atmospheric pollution sources based on measurement data and adjoint problem methods.**

The article presents an approach to estimating and adjusting the emission power of anthropogenic sources based on forward and inverse modeling. The WRF-Chem model was used as a direct modeling tool, and the IMDAF system developed by the authors was used for inverse modeling. The results of direct modeling provided data on meteorological fields and the distribution of impurities necessary for solving adjoint problems. The use of the adjoint problem method made it possible to calculate a correction factor that determines how much it is necessary to change the power of sources that fall into the sensitivity zone to achieve the best agreement with measurements.