

# МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ ПРИРОДООХРАННОГО ПРОГНОЗИРОВАНИЯ

В.В.Пененко

Институт вычислительной математики  
и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

## NUMERICAL MODELS AND METHODS OF ENVIRONMENTAL FORECASTING

V.V. Penenko

Institute of Computational Mathematics and  
Mathematical Geophysics SB RAS, Novosibirsk

*A concept of environmental forecasting on the base of variational approach is discussed. The basic idea is to strengthen the modeling capacity by combination of the forward and inverse methods. Due to this, the range of related environmental problems that can be solved is substantially larger.*

### **Введение**

Прогнозирование изменений качества атмосферы и природной среды под воздействием естественных и антропогенных факторов относится к классу взаимосвязанных задач экологии и климата. Фундаментальное значение в них имеют понятия рисков и уязвимости территорий-рецепторов, обусловленных интенсивными выбросами загрязняющих примесей, тепла и влаги, а также изменениями характеристик поверхности Земли. Для решения этих задач и доведения получаемых результатов до восприятия их обществом требуются новые эффективные методы исследования и технологии математического моделирования, основанные на совместном использовании математических моделей и фактических данных о процессах в природной среде. Здесь излагаются основные положения концепции природоохранного прогнозирования на базе вариационных принципов, которая сформировалась в ИВМ и МГ СО РАН к настоящему времени.

### **Характеристика методов прогнозирования**

Современные модели качества атмосферы представляют собой многофункциональные комплексы. В зависимости от целей исследования в них включают модели динамики атмосферы, переноса и трансформации примесей в газовом и аэрозольном состояниях; способы задания и оценок эмиссионных факторов действующих и потенциально возможных источников; количественные описания последствий неблагоприятных воздействий на здоровье населения и экосистемы; методологию оценок социальных и экономических реакций на антропогенные воздействия и т.д. [1-4].

К основным количественным характеристикам качества окружающей среды обычно относят функции, описывающие концентрации многокомпонентных газо-аэрозольных субстанций, которые распределены в четырехмерной пространственно-временной области. Традиционный подход к получению таких характеристик обычно базируется на методах прямого моделирования. Суть их состоит в решении начально-краевых задач при различных способах задания входных данных и внешних воздействий.

Методы прямого моделирования целесообразно использовать для краткосрочного прогнозирования элементов химической и аэрозольной погоды в реальном времени. Для оценок долгосрочных экологических перспектив и природоохранного проектирования в условиях изменяющегося климата требуются новые подходы обратного моделирования.

Предлагаемая нами концепция прогнозирования базируется на вариационных принципах и методах теории оптимизации [2,3,5-7] и реализуется методами прямого и обратного моделирования в сочетании с методами расщепления и декомпозиции [8-10]. Это

дает новые постановки задач прогнозирования и проектирования и расширяет области их применения [5,11].

Одна из основных идей состоит в том, чтобы, кроме прогнозирования методами прямого моделирования, оценивать, используя вариационные принципы, целевые характеристики развития ситуаций и по ним рассчитывать относительную долю вклада всех действующих и потенциально возможных источников в загрязнение выделенных территорий-рецепторов. При этом математические модели процессов, оценки эмиссионных факторов, экспозиционных воздействий и социально-экономических последствий выступают в роли ограничений на класс функций для оценок целевых функционалов, которые определяются в виде функционалов на пространствах функций состояния и параметров моделей. Они выражаются интегралами с соответствующими весовыми функциями.

Формирование гидродинамического фона для расчета прогностических сценариев осуществляется с помощью математических моделей циркуляции атмосферы с использованием всей доступной фактической информации. В модели включается направляющее фазовое пространство, рассчитываемое с помощью реконструкции полей по информативным базисам. Сами базисы рассчитываются методами ортогональной декомпозиции баз данных климатической информации по заданным критериям информативности. Эти методы являются эффективным инструментом для общего анализа ситуаций и выявления областей климатически обусловленных рисков [11,12].

### Реализация концепции прогнозирования. Постановка задачи

В комплекс математических моделей входят модели динамики атмосферы, предназначенные для формирования гидродинамики несущей среды, а также модели, описывающие процессы переноса и трансформации различных субстанций, предназначенные для воспроизведения и прогнозирования качества атмосферы.

Структуру этих моделей можно представить в операторном виде

$$L(\Phi, \mathbf{Y}) \equiv \frac{\partial \Phi}{\partial t} + G(\Phi, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \mathbf{r} = 0, \quad \Phi(\mathbf{x}, t, \mathbf{Y}) \in Q(D_t), \quad (1)$$

$$\Phi^0 = \Phi_a^0 + \xi, \quad \mathbf{Y} = \mathbf{Y}_a + \zeta, \quad (2)$$

где  $Q(D_t)$  – вещественное пространство вектор-функций состояния  $\Phi(\mathbf{x}, t, \mathbf{Y})$ ,  $\mathbf{Y}$  – вектор параметров модели, принадлежащий области допустимых значений  $R(D_t)$ ,  $G(\Phi, \mathbf{Y})$  – нелинейный матричный дифференциальный оператор, основными элементами которого являются операторы типа конвекции – диффузии – реакции для многокомпонентных переменных состояния и параметров;  $\mathbf{f}$  – функции источников,  $\Phi^0$  – начальное состояние;  $\Phi_a^0, \mathbf{Y}_a$  – априорные оценки;  $D_t = D \times [0, \bar{t}]$ ,  $D$  – область изменения пространственных координат,  $t \in [0, \bar{t}]$  – интервал изменения времени. Область  $D$  может быть глобальной на сферической Земле, либо ограниченной частью глобальной системы. Функции  $\mathbf{r}, \xi, \zeta$  в (1)–(2) описывают неопределенности и ошибки соответствующих объектов.

### Данные и модели наблюдений

Обозначим через  $\Psi_{obs}$  набор доступных данных измерений, представленных на многообразии  $D_t^{obs} \subset D_t$ , и определим совокупность моделей наблюдений  $H(\Phi)$  для формирования образов измеряемых величин в терминах функций состояния моделей процессов (1)–(2):

$$\Psi_{obs} = H(\Phi) + \eta. \quad (3)$$

Здесь  $\eta$  – ошибки и неопределенности модели наблюдений и данных измерений,  $H(\Phi)$  – нелинейный ограниченный оператор, дифференцируемый по переменным состояния.

При построении алгоритмов в число компонент вектора параметров удобно включать

не только внутренние характеристики моделей, но и функции, описывающие источники, начальные условия и неоднородности краевых условий.

### Функционалы обобщенных оценок

Задачи оценки состояния окружающей среды и природоохранного прогнозирования имеют многоцелевой характер. Поэтому для их решения требуется технология моделирования, адаптируемая к различным постановкам и критериям. Чтобы это обеспечить, в систему, кроме математических моделей, вводится набор обобщенных характеристик. Такие характеристики для количественных оценок будем задавать в виде функционалов, определенных на множестве переменных состояния и параметров:

$$\Phi_k(\varphi) = \int_{D_t} F_k(\varphi) \chi_k(\mathbf{x}, t) dDdt \equiv (F_k, \chi_k), \chi_k \in Q^*(D_t), k = \overline{1, K}, K \geq 1. \quad (4)$$

Здесь  $F_k(\varphi) \in Q(D_t)$  – оцениваемые функции заданного вида, ограниченные и дифференцируемые относительно  $\varphi$ ;  $\chi_k(\mathbf{x}, t) \geq 0, \chi_k(\mathbf{x}, t) dDdt$  – неотрицательные весовые функции и соответствующие им меры Радона или Дирака;  $Q^*(D_t)$  – пространство функций, сопряженных по отношению к  $Q(D_t)$ . Символом  $(F_k, \chi_k)$  обозначается скалярное произведение. Носители ненулевых значений весовых функций будем интерпретировать как области-рецепторы  $D_{rk} \in D_t$ .

### Вариационные принципы для организации технологии прогнозирования

Для решения задач используем вариационный принцип [3]. Определим расширенный функционал, объединяющий все элементы системы моделирования (1)-(4):

$$\tilde{\Phi}_k^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi_k^*, \mathbf{r}, \xi, \zeta) = \left[ I^h(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi_k^*) \right]_{D_t^h} + \left\{ \alpha_0 \Phi_k(\varphi) + 0,5 \alpha_1 (\boldsymbol{\eta}^T W_1 \boldsymbol{\eta})_{D_t^m} \right\}^h + 0,5 \left\{ \alpha_2 (\mathbf{r}^T W_2 \mathbf{r})_{D_t^h} + \alpha_3 (\xi^T W_3 \xi)_{D_t^h} + \alpha_4 (\zeta^T W_4 \zeta)_{R^h(D_t^h)} \right\}^h, \quad k = \overline{1, K}, \quad (5)$$

$$I(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi^*) \equiv (L(\varphi, \mathbf{Y}), \varphi^*) = \int_{D_t} \left( B \frac{\partial \varphi}{\partial t} + G(\varphi, \mathbf{Y}) - \mathbf{f} - \mathbf{r}, \varphi^* \right) dDdt = 0. \quad (6)$$

Здесь  $\varphi^* \in Q^*(D_t)$  – вспомогательные функции, определяемые спецификой вариационного принципа и принадлежащие пространству, сопряженному по отношению к пространству функций состояния; функционал  $I(\varphi, \mathbf{Y}, \varphi^*) = 0$  представляет собой интегральное тождество для описания моделей (1)–(2) в вариационной формулировке;  $\Phi_k(\varphi)$  – целевой функционал вида (4); индексом  $h$  отмечены дискретные аналоги соответствующих объектов;  $\alpha_i \geq 0, (i = \overline{0, 4})$  – весовые коэффициенты; индекс  $T$  обозначает операцию транспонирования. Последние четыре функционала в (5) выражают суммарную меру неопределенностей в моделях и данных. Они определены с помощью взвешенных скалярных произведений энергетического типа. В третьем слагаемом выражения (5), содержащем функцию  $\boldsymbol{\eta}$  из (3), учитываются все доступные данные наблюдений  $\Psi_{obs}$ . Функционал в (6) выбирается так, чтобы при  $\varphi^* = \varphi$  это соотношение превращалось в уравнение баланса полной энергии системы. Весовые матрицы  $W_i (i = \overline{1, 4})$  в (5) определим таким образом, чтобы функционалы выражали энергетическую норму, учитывающую различия в физических размерностях соответствующих многокомпонентных функций.

### Построение дискретных аппроксимаций.

Для этих целей вводится сеточная область  $D_t^h \in D_t$ , и для дискретизации операторов и функционалов используются методы расщепления и декомпозиции [1,3,8–10]. Численные

схемы для операторов конвекции – диффузии - реакции из (1) строятся с помощью конструктивного аппарата локально-сопряженных задач, обеспечивающего свойства монотонности, устойчивости при высокой точности аппроксимаций [13].

Не описывая подробно вычислительную технологию, представим ее основные элементы, реализующие условия стационарности расширенного функционала (6) по отношению к вариациям его функциональных аргументов:

$$\partial \tilde{\Phi}_k^h / \partial s = 0 \quad (s = \varphi^*, \varphi, \mathbf{r}, \xi, \zeta)^h, \quad k = \overline{1, K}. \quad (7)$$

В результате преобразований по алгоритму (7) получается комплекс дискретно-аналитических аналогов базовых элементов технологии прогнозирования: одна система уравнений для основной прямой задачи (1)–(2),  $K$  систем для сопряженных задач и по  $K$  систем для расчета каждой из функций неопределенностей. Здесь  $K$  – число функционалов качества. В силу условий (7), численные схемы являются оптимальными с позиций оценивания вариаций функционалов (5),(6). При использовании метода расщепления и декомпозиции, они представляют собой совокупности схем расщепления. Оптимальность состоит в том, что оценки прогностических функционалов не зависят от вариаций прогнозируемых величин, представляющих функциональные аргументы в (5)–(7), обусловленных совокупностью ошибок входных данных и параметров моделей.

### Алгоритмы теории чувствительности

После решения задач, определяемых условиями (7), рассчитываются соотношения чувствительности для оценок вариаций целевых функционалов и формирования обратных связей с помощью алгоритма

$$\delta \Phi_k^h(\varphi) \equiv (\text{grad}_{\mathbf{Y}} \Phi_k^h(\varphi), \delta \mathbf{Y}) \equiv \frac{\partial}{\partial \alpha} I^h(\varphi, \mathbf{Y} + \alpha \delta \mathbf{Y}, \varphi_k^*)|_{\alpha=0} \equiv (\Gamma_k, \delta \mathbf{Y}), \quad (8)$$

$$\Gamma_k \equiv \text{grad}_{\mathbf{Y}} \Phi_k^h(\varphi) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{Y}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \alpha} I^h(\varphi, \mathbf{Y} + \alpha \delta \mathbf{Y}, \varphi_k^*)|_{\alpha=0} \right\}, \quad (9)$$

$$\frac{d\mathbf{Y}}{dt} = -\kappa \text{grad}_{\mathbf{Y}} \Phi_k^h(\varphi), \quad k = \overline{1, K}, \quad (10)$$

где  $\delta \mathbf{Y}$  – вариации параметров;  $a$ ,  $\kappa$  – вещественные параметры;  $\varphi$  – решение основной задачи;  $\varphi_k^*$  – решения сопряженных задач, порожденных функционалом  $\tilde{\Phi}_k$  ( $k = \overline{1, K}$ ) при заданных значениях набора параметров  $\mathbf{Y}$ ,  $\Gamma_k$  – вектор, компоненты которого представляют собой функции чувствительности (ФЧ) функционала  $\Phi_k^h(\varphi)$  к вариациям компонент вектора  $\mathbf{Y}$ . Как уже отмечалось выше, для удобства построения алгоритмических конструкций, функции источников, начальных данных моделей включены в число компонент вектора параметров  $\mathbf{Y} = \{Y_i, i = \overline{1, N}\}$ ,  $N$  – число категорий параметров в составе  $\mathbf{Y}$ . Система (10) представляет собой совокупность уравнений обратных связей для оценок параметров моделей процессов в зависимости от изменения соответствующих им ФЧ [3].

### Об оценках экологических рисков

Методы теории чувствительности удобно использовать для оценок и прогнозирования экологических рисков и уязвимости территорий по отношению к воздействиям антропогенных факторов, учитываемых в моделях процессов [5,11]. Прокомментируем с этих позиций смысл соотношения чувствительности (8). Самое главное - оно показывает, что все элементы моделей взаимосвязаны, и для оценок функционалов необходимо учитывать возможные возмущения всех входных параметров и внешних источников. Особо следует отметить выражения, содержащие источники тепла, влаги и примесей. Множители, стоящие при вариациях источников, есть соответствующие ФЧ. Они являются мерой непосредственного влияния вариаций источников на значение вариаций функционала. В

линейных задачах - влияния самих источников на значение функционала. Другими словами, они содержат количественную меру риска получить загрязнения в атмосферу рецептора  $D_{rk}$  от всех действующих потенциально возможных источников в области  $D_t$ .

Таким образом, находясь в рамках вариационного подхода и выполняя операции, предусмотренные алгоритмами (7)–(10), исследователь рассматривает всю климатическую систему, определенную моделями в  $D_t$  и содержащую различные источники естественных и антропогенных воздействий, с точки зрения региона-рецептора. Категории опасности, риска, уязвимости можно дополнить понятием информативности системы мониторинга, расположенной на территории рецептора, и связать эти категории с понятием наблюдаемости систем. Общее условие наблюдаемости для моделей рассматриваемого класса заключается в том, чтобы носители ФЧ, рассчитываемых для выбранного функционала измерений, накрывали области действия оцениваемых параметров или источников. Эти свойства функций наблюдаемости для распределенной системы мониторинга используются для обнаружения местоположения и времени действия источников, попадающих в области риска-наблюдаемости, но недоступных непосредственным измерениям [5].

### **Роль сопряженных задач и функций неопределенностей.**

Фундаментальная роль сопряженных задач в вариационной технологии моделирования сложных систем состоит в том, что они являются инструментом для формирования связей между возмущениями объектов (4), определенных в пространстве функций состояния  $Q(D_t)$ , с возмущениями характеристик из пространства параметров. Они, с помощью функций чувствительности, берут на себя все внутренние степени свободы численной модели. Как следствие, организация технологии прогнозирования осуществляется на основе соотношений чувствительности (8)–(9). В этом и состоит основная идея концепции: перейти из пространства функций состояния в пространство параметров и источников, чтобы работать только с внешними степенями свободы методами теории чувствительности и обратных задач на уровне целевых функционалов.

Вариационные формулировки системы прогнозирования с оценкой неопределенностей позволяют построить высокоэффективные алгоритмы последовательного усвоения данных в реальном времени. Функции неопределенностей играют роль управления, вносимые в систему для достижения минимума целевого функционала (4). С точки зрения вычислительной математики они дают эффекты регуляризации для решения обратных задач в рамках системы (7)–(10).

Совместный анализ функций чувствительности, наблюдаемости и неопределенности вносит также новое качество в организацию адаптивных стратегий мониторинга, когда, кроме фиксированной системы наблюдений, требуется спланировать наблюдательные эксперименты на базе подвижных средств измерений. Для размещения таких наблюдений в первую очередь целесообразно рассматривать области с повышенными уровнями неопределенностей и чувствительности и с пониженными уровнями значений наблюдаемости на базе фиксированной системы мониторинга. Это направление имеет перспективу практического использования при формировании наблюдательных программ, сочетающих стационарные и мобильные средства мониторинга с интерактивными методами усвоения данных.

### **Заключение**

В заключение сформулируем преимущества предлагаемой концепции по сравнению с традиционными подходами прямого моделирования.

Вариационные формулировки задач, используемые в информационно-моделирующей технологии, обеспечивают высокую степень согласованности моделей различных пространственно-временных масштабов, численных схем и алгоритмов их реализации. Это

позволяет уменьшить степень неопределенности всех компонентов системы моделирования. Принципиальное значение имеет тот факт, что применение алгоритмического аппарата сопряженных задач и теории чувствительности позволяет прогнозировать степень риска и уязвимости даже без информации об источниках загрязнений и начальных полях функций состояния.

Организация сценариев долгосрочного прогнозирования с использованием информативных базисов для малопараметрической реконструкции многомерных фазовых пространств создает предпосылки для повышения степени достоверности прогнозов. Численные методы, построенные на вариационных принципах, соответствуют уровню современных вычислительных технологий по качеству и эффективности реализации.

Такой подход в природоохранном прогнозировании удобен при проектировании новых объектов и организации природоохранных мероприятий с позиций минимизации рисков для населения и адаптации его к изменяющимся условиям. Действительно, количественные оценки вкладов каждого источника делают «прозрачными» отношения между объектами-источниками примесей и объектами – получателями загрязнений. Это удобно для принятия управленческих решений по обеспечению стандартов качества в упреждающем режиме и выявлению источников - нарушителей требований стандартов. Анализируя функции риска, можно разделить степень опасности от источников, которые расположены в регионе и за его пределами.

Работа выполнена при поддержке Программ 4 Президиума РАН и 1.3 ОМН РАН, а также проекта РФФИ 07-05-00673.

#### **Список литературы**

1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982.
2. Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992.
3. Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоздат, 1981.
4. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985.
5. Пененко В.В. О концепции природоохранного прогнозирования// Оптика атмосферы и океана, 2010, т.23, №6, 432-438.
6. Лионс Ж.Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частным производными. М.: Мир, 1972.
7. Брайсон А., Хо Ю. Прикладная теория оптимального управления. М: Мир, 1972.
8. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967.
9. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. М.: Наука, 2001.
10. Бенсусан А., Лионс Ж.-Л., Темам Р. Методы декомпозиции, децентрализации и координации и их приложения. В сб. Методы вычислительной математики. Новосибирск: Наука, 1975, с. 144- 189.
11. Пененко В.В., Цветова Е.А. Оптимальное прогнозирование природных процессов с оценкой неопределенности// ПМТФ. 2009, №2, 156-166.
12. Penenko V., Tsvetova E. Orthogonal decomposition methods for inclusion of climatic data into environmental studies // Ecol. Model. 2008. V. 217. P. 279–291.
13. Penenko V., Tsvetova E. Discrete-analytical methods for the implementation of variational principles in environmental applications// Journal of Computational and Applied Mathematics 2009. V. 226. P. 319-330.