

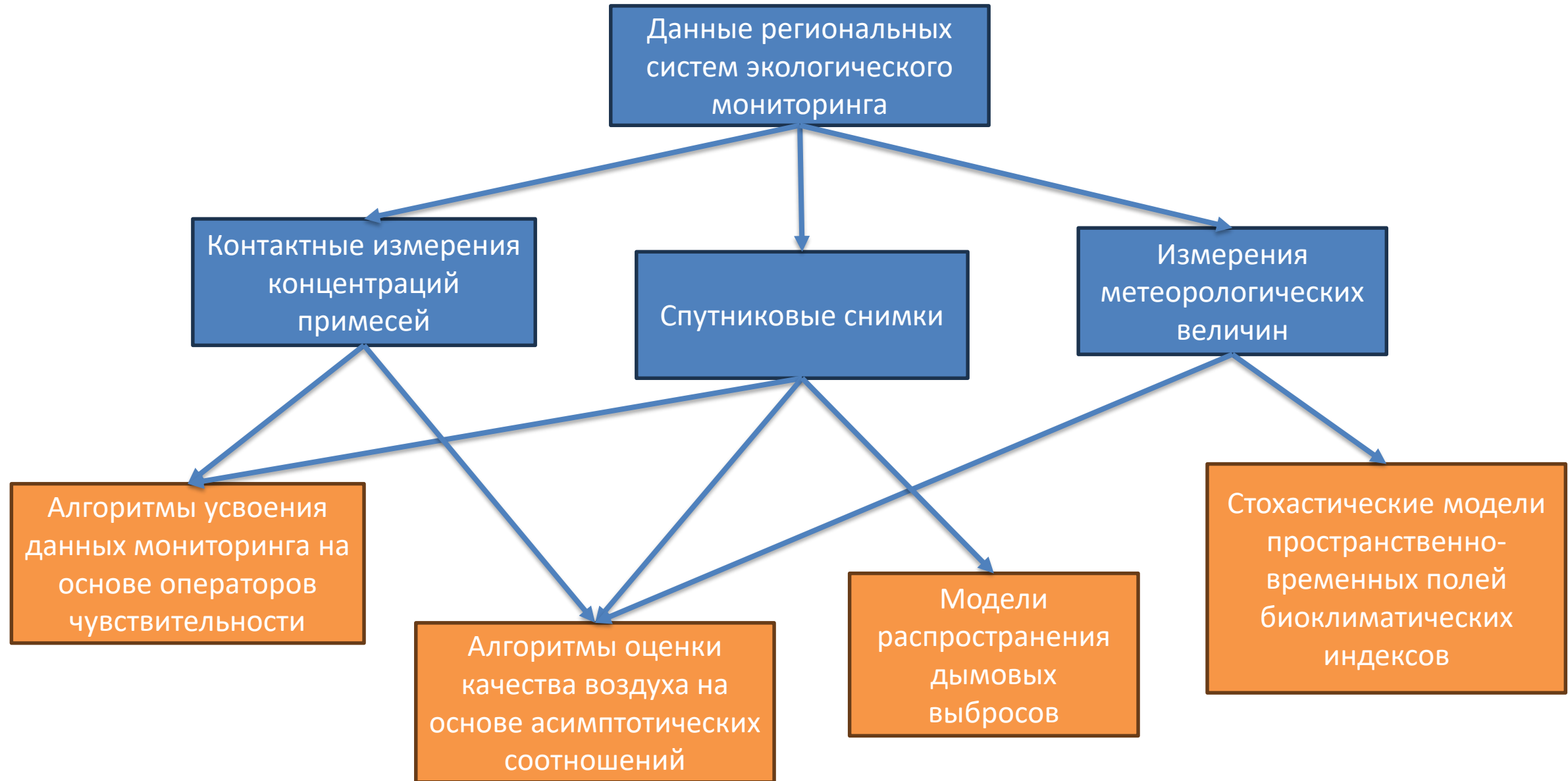
АЛГОРИТМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ РЕГИОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

А.В. Пененко, В.Ф. Рапута, Н.А. Каргаполова, А.А. Леженин, Э.А. Пьянова, А.В. Гочаков,
П.Н. Антохин, Е.В. Русин, Р. А. Кузьминых, М.А. Акентьева, О.А. Сеницина, М.К. Емельянов,
В.В. Пененко



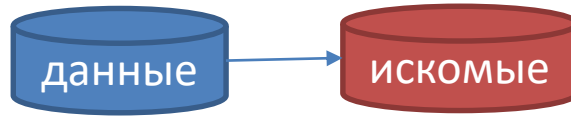
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Основные направления работы по проекту

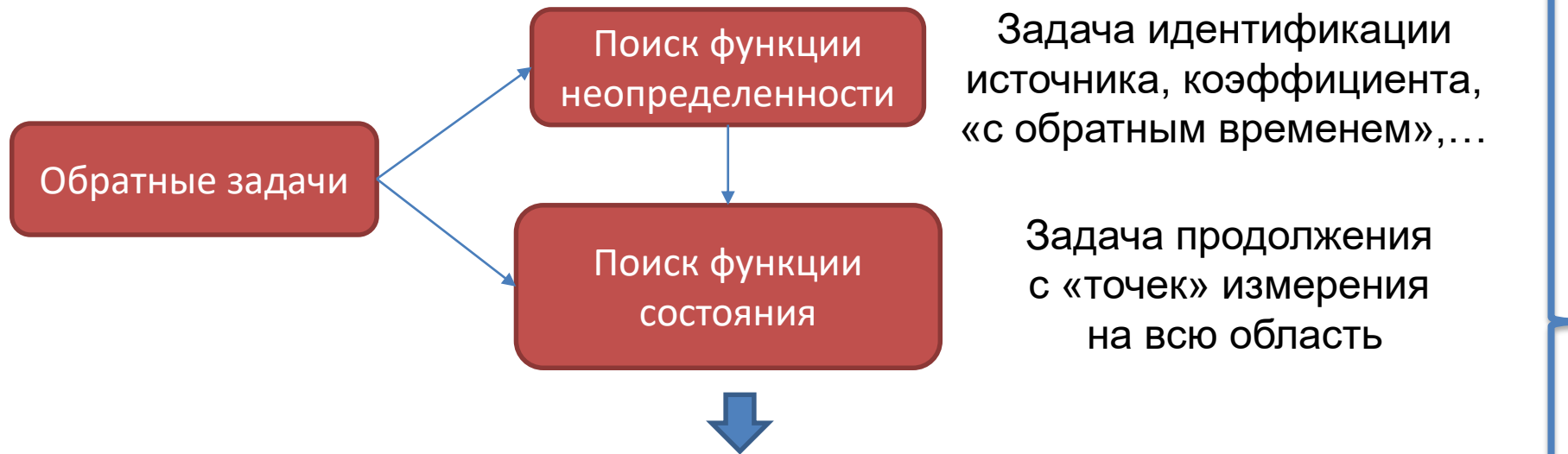


Постановка задачи усвоения данных

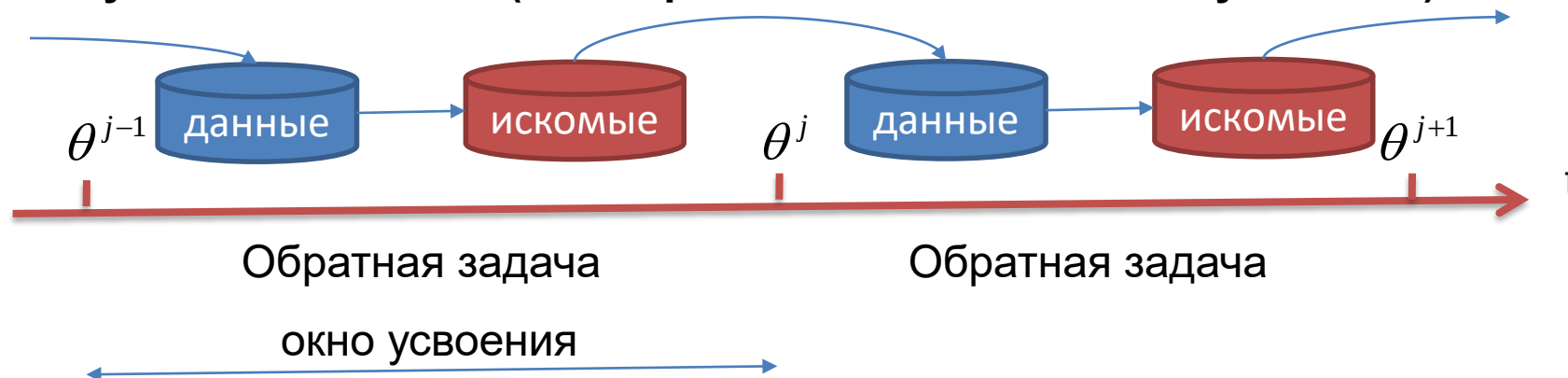
Обратная задача



t



Задача усвоения данных (с непересекающимися окнами усвоения)



Алгоритм усвоения данных

Решение обратной задачи в окне усвоения

Перенос результата с прошлого окна усвоения на следующее

Модель адвекции-диффузии-реакции

Область $\Omega_T = \Omega \times [0, T]$ достаточно гладкая аппроксимация прямоугольной

**Функция
неопределённости**

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial t} - \underbrace{\nabla \cdot (\text{diag}(\mu_l) \nabla \varphi_l - \mathbf{u} \varphi_l)}_{\text{адвекция-диффузия}} + \underbrace{P_l(t, \varphi, \mathbf{y}) \varphi_l}_{\text{продукция-деструкция}} = \Pi_l(t, \varphi, \mathbf{y}) + f_l + r_l,$$

Семейство моделей: 0D, 1D, 2D, 3D

$l = 1, \dots, N_c$ - количество компонентов

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{n} \cdot (\text{diag}(\mu_l) \nabla \varphi_l) + \beta_l \varphi_l = \alpha_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(out)} \subset \partial\Omega \times (0, T], \\ \varphi_l = \alpha_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(in)} \subset \partial\Omega \times (0, T], \\ \varphi_l = \varphi_l^0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, t = 0, \end{array} \right.$$

- Полиномы
- Сигмоидные функции
- P_l, Π_l : • Аппроксимации интегралов

**Оператор
прямой задачи**

$$q = \{\mu, r, y\}$$

$$\varphi: \begin{cases} Q \rightarrow \Phi \\ q \mapsto \varphi \end{cases},$$

Оператор измерений H

- Линейные
 - Контактные измерения
 - Изображения
 - Вертикальные профили
- Нелинейные измерений

Обратная задача

$$\mathbf{I} = H \underbrace{\varphi[q^{(*)}]}_{\text{Найти}} + \delta \mathbf{I},$$

↑ Дано
↑ Шум

Оператор чувствительности



Идея: [Марчук Г. И., О постановке некоторых обратных задач, Доклады Академии Наук СССР / Изд. Наука, 1964, 156, 503–506]

Image (model) to structure operator [Dimet et al, 2015]

Зададим Ξ функций проектирования $U = \{h^{(\xi)}\}_{\xi \in \Xi} \subset U_{meas}$

Контроль размерности уравнений, фильтрация

$$H_U(\phi[\mathbf{q}^{(2)}] - \phi[\mathbf{q}^{(1)}]) = \sum_{\xi \in \Xi} \langle \phi[\mathbf{q}^{(2)}] - \phi[\mathbf{q}^{(1)}], h^{(\xi)} \rangle_{\Phi} \mathbf{e}^{(\xi)}$$

Соотношение чувствительности
(Тождество типа Лагранжа)

$$\langle \phi[\mathbf{q}^{(2)}] - \phi[\mathbf{q}^{(1)}], h^{(\xi)} \rangle_{\Phi} = \langle M[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; h^{(\xi)}], \mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)} \rangle_Q$$

Оператор чувствительности

$$M_U[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}]: \begin{cases} R \rightarrow \mathbb{R}^{\Xi} \\ \mathbf{z} \mapsto \sum_{\xi \in \Xi} \langle M[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; h^{(\xi)}], \mathbf{z} \rangle_R \mathbf{e}^{(\xi)}, \end{cases} \quad \text{Параллельно по } U$$

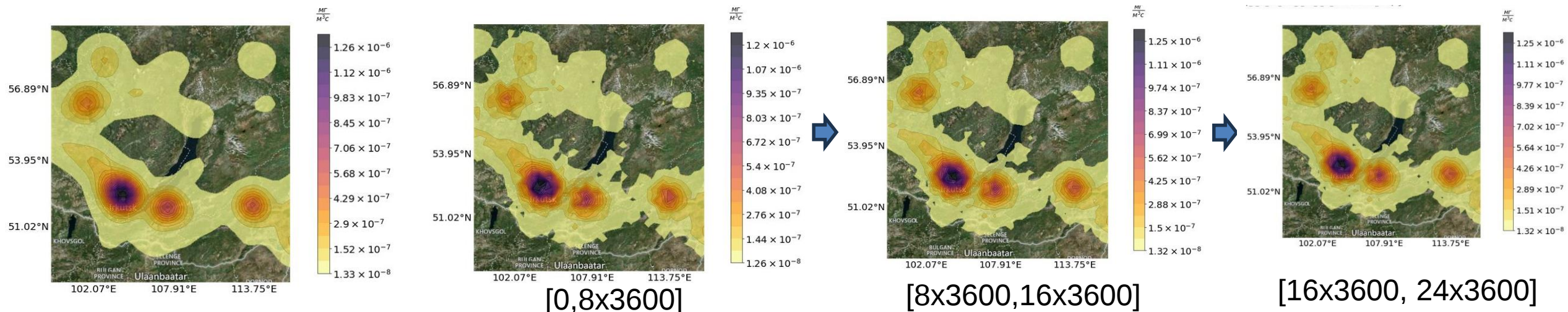
Решение обратной задачи $\mathbf{q}^{(*)}$ для любых $\mathbf{q}$ и U удовлетворяет

$$H_U \left(\mathbf{I} - \text{Pr}_{U_{meas}} \phi[\mathbf{q}] \right) = M_U[\mathbf{q}^{(*)}, \mathbf{q}] (\mathbf{q}^{(*)} - \mathbf{q}) + H_U \delta \mathbf{I}.$$

параметрическому семейству
квазилинейных операторных уравнений

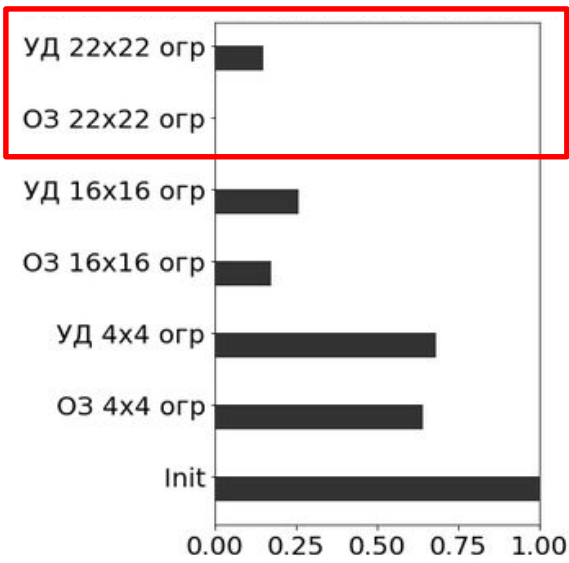
Усвоение данных и обратные задачи для трёхмерной модели

Восстановление в окнах усвоения

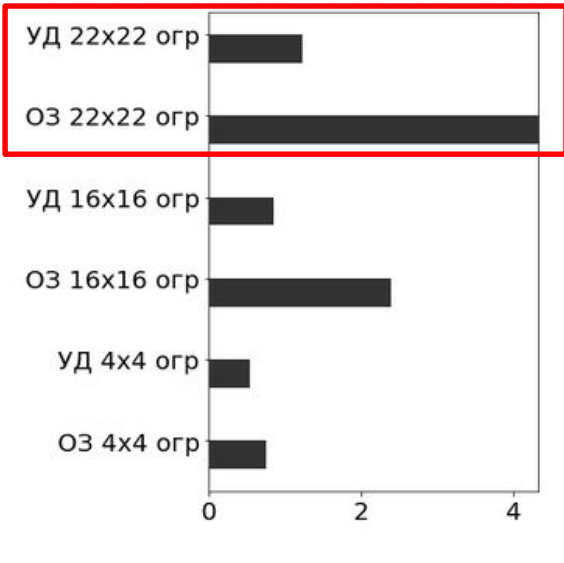


«Истинное» решение

- Положительный постоянный источник NO на поверхности
- NOx-O3 фотохимический цикл
- Интервал 24ч
- Nc=5, Nx=60, Ny=57, Nz=10, Nt=771
- Окно усвоения 8h
- Интегральное (total-column) измерение O3 каждые 4 часа
- Метеорология из модели WRF
- Функций проектирования: 5x22x22



Относительная ошибка в источниках

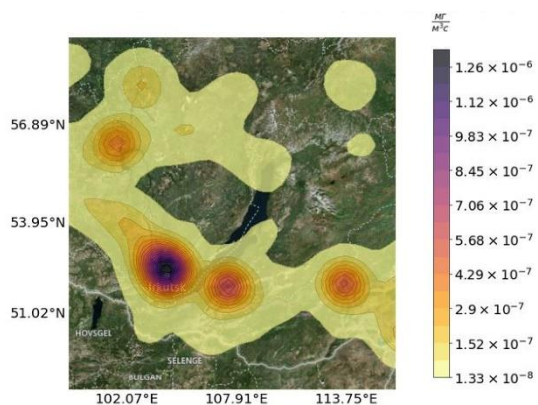


Время вычислений, часы

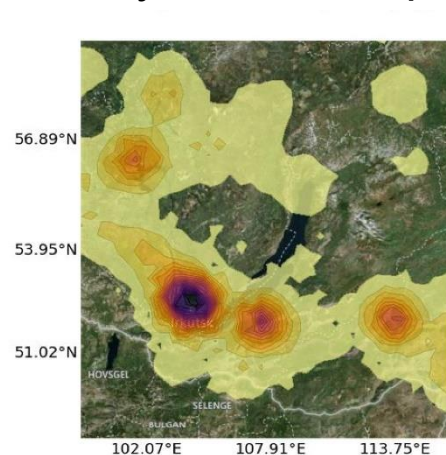
Устойчивость алгоритма усвоения данных

Возмущение данных: $I_i = (1 + \delta\xi)\bar{I}_i, \xi \sim U(-1,1)$

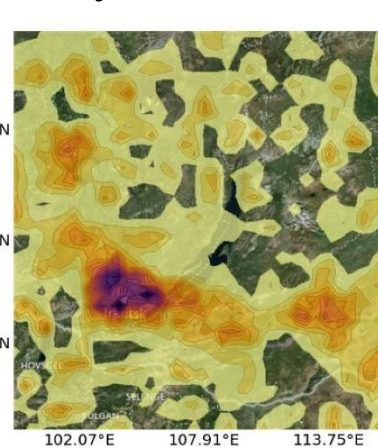
Точное решение



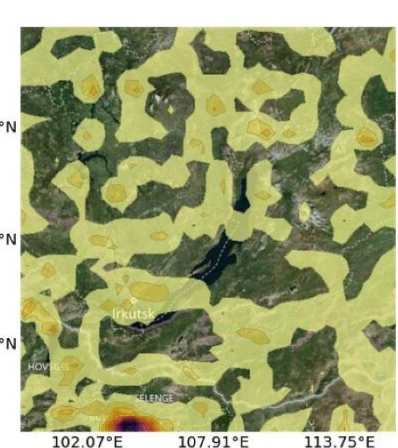
Результаты на финальном окне усвоения в зависимости от уровня шума



$\delta = 0$

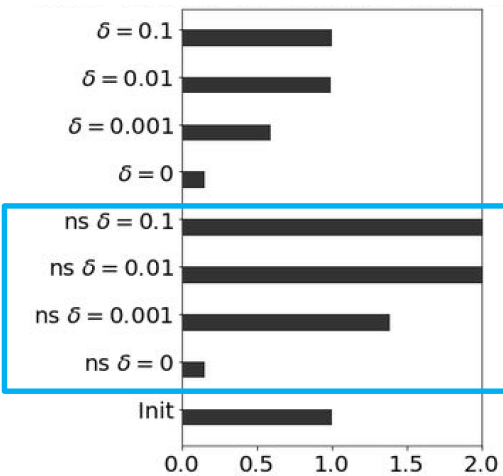


$\delta = 0.001$

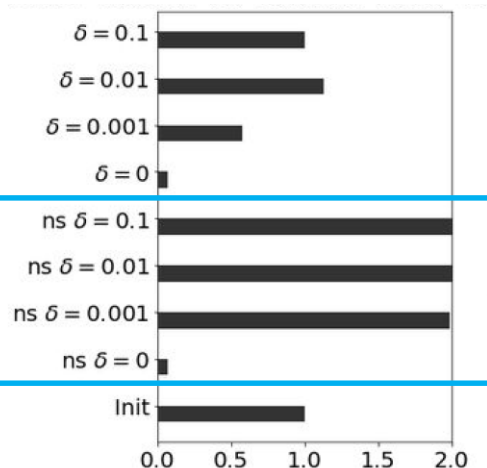


$\delta = 0.01$

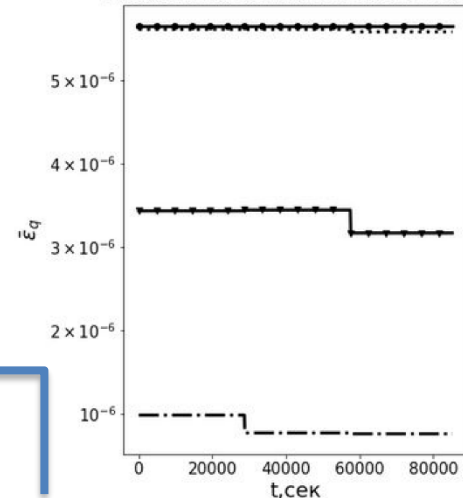
Относительная ошибка
источники



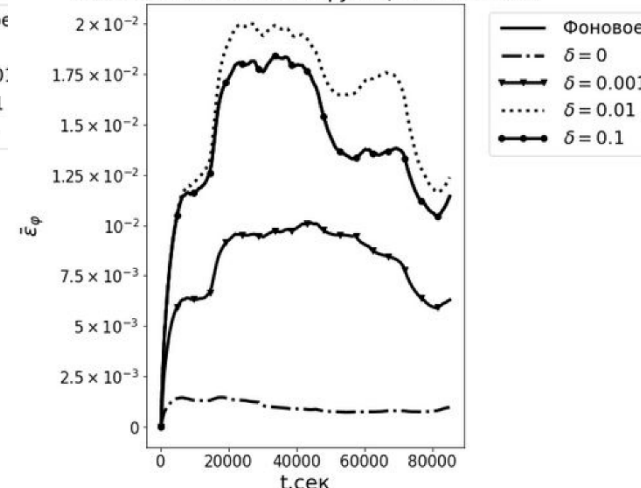
Относительная ошибка
траектории



Абсолютная ошибка в источниках



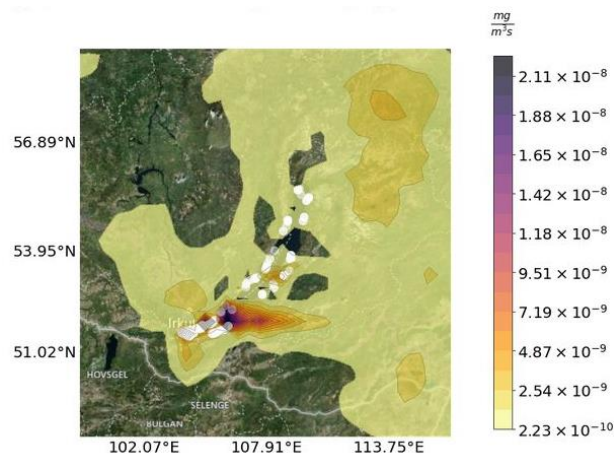
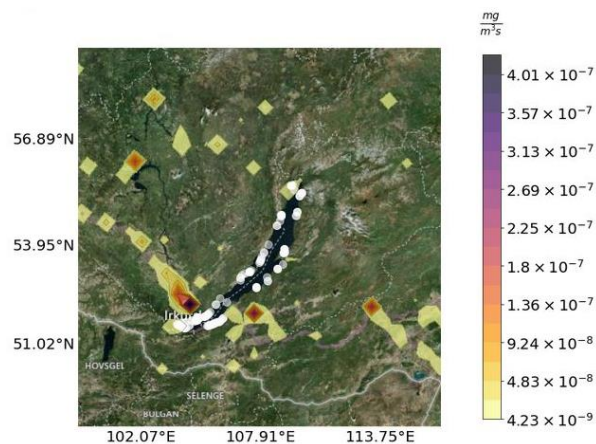
Абсолютная ошибка в функции состояния



«Игнор шума»

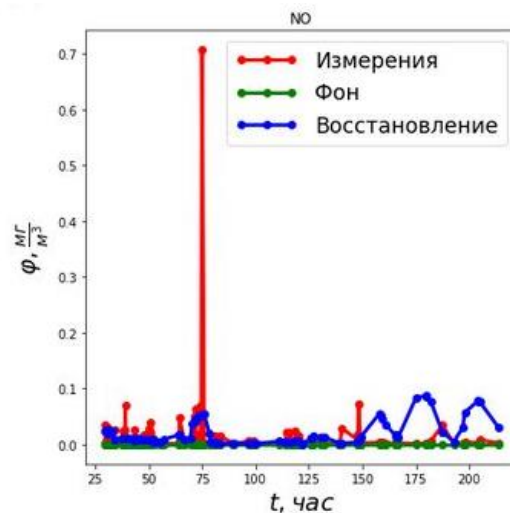
Усвоение данных контактных измерений

Интерпретация данных
Корабельной экспедиции
2019 от ЛИН СО РАН

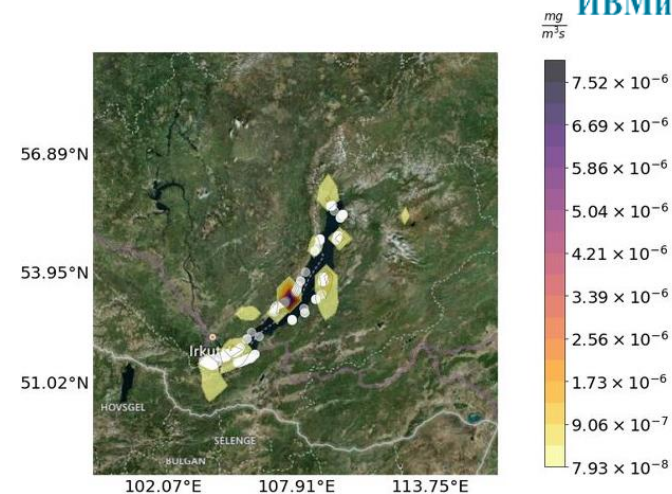


Восстановление по
синтетическим данным

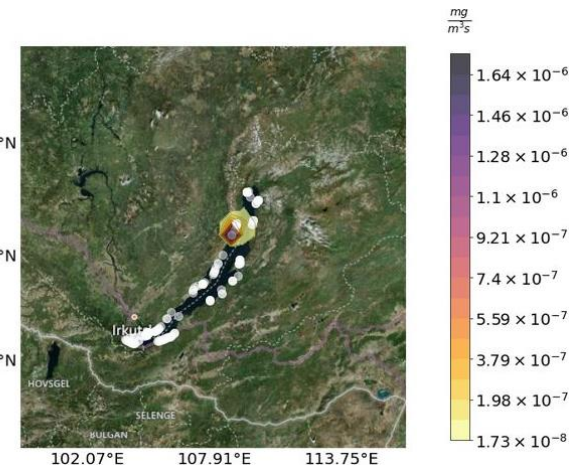
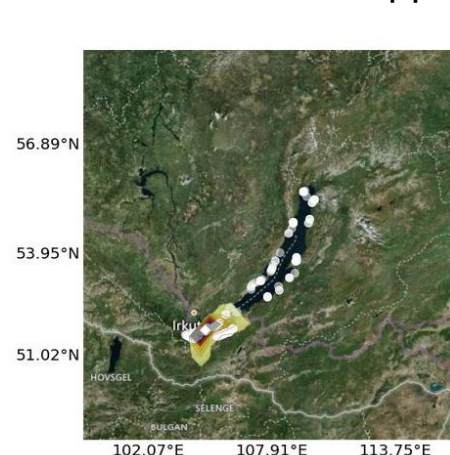
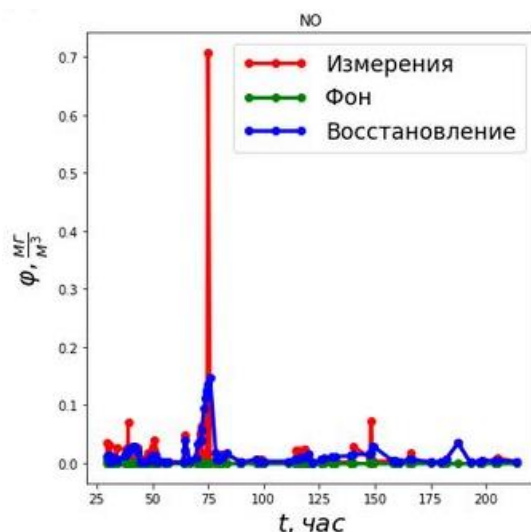
Обратная задача



Приближение всех данных «одним» источником



Усвоение данных



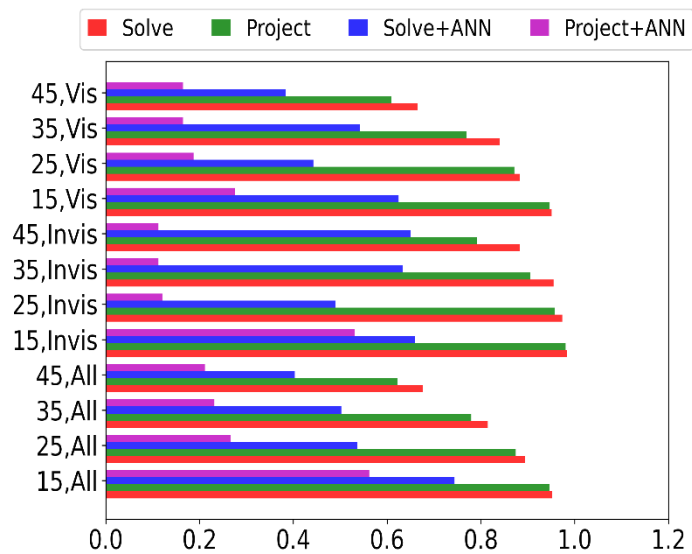
Свой источник в каждом окне усвоения

- Метеорология из модели COSMO
- Положительный постоянный источник NO на поверхности
- NOx-O3 фотохимический цикл
- Интервал: 2019.07.23 12:00 + 10 дней
- Nc=5, Nx=36, Ny=38, Nz=17, Nt=781
- Окно усвоения 8 часов
- Контактные данные: 128 агрегатов из 185 измерений NO

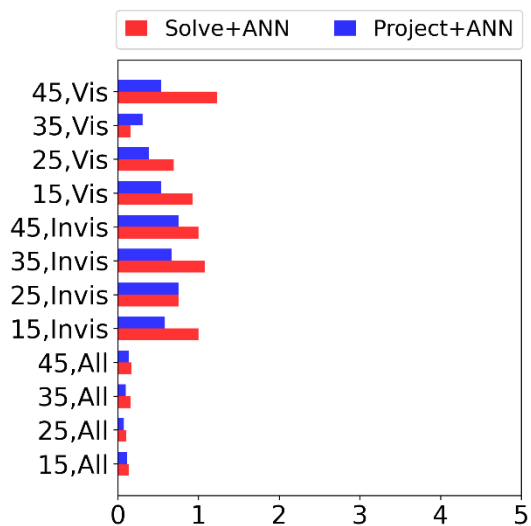
Гибрид IMDAF с ANN уточнением («точечности»)



Результаты IMDAF с ANN уточнением

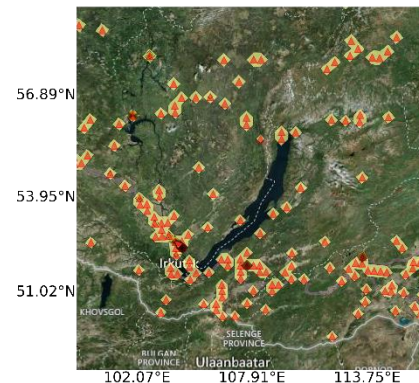


Relative error

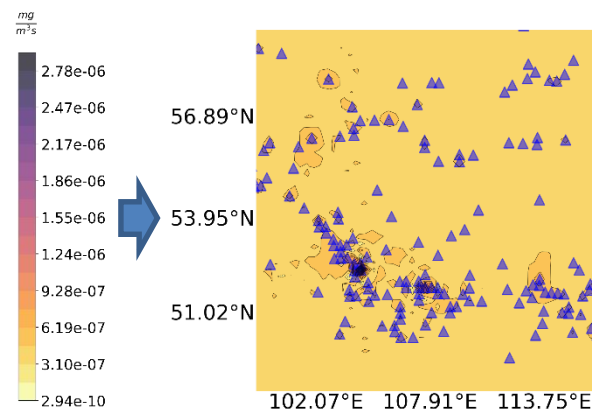


Relative complexity error

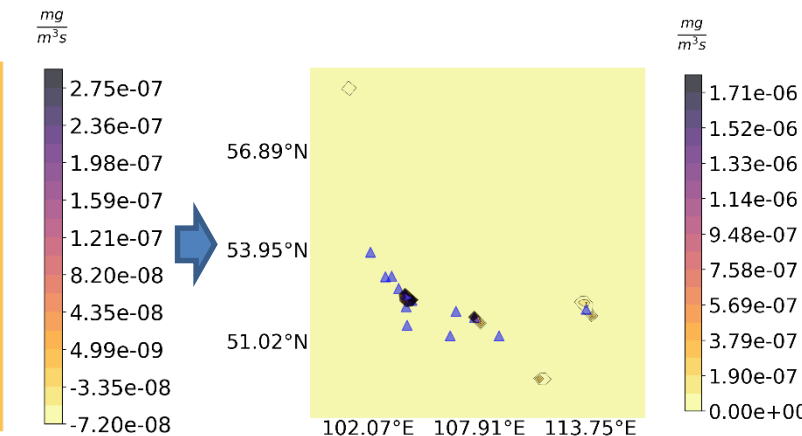
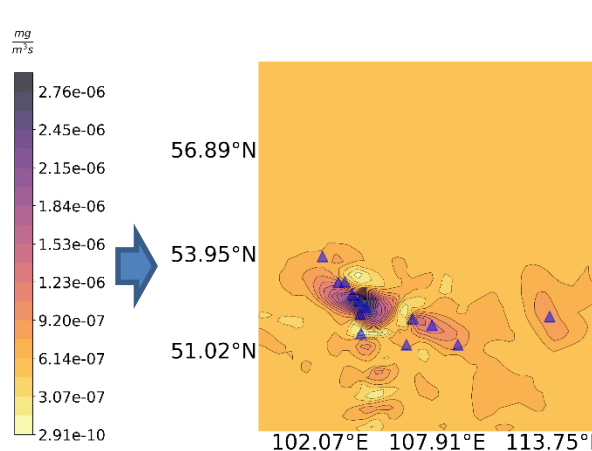
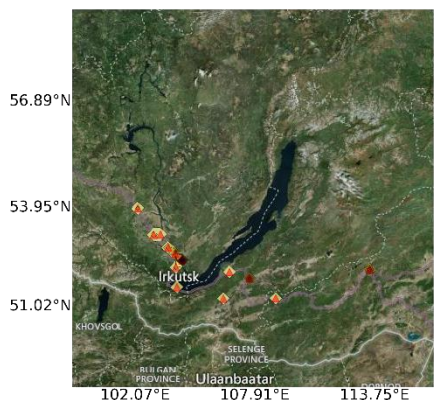
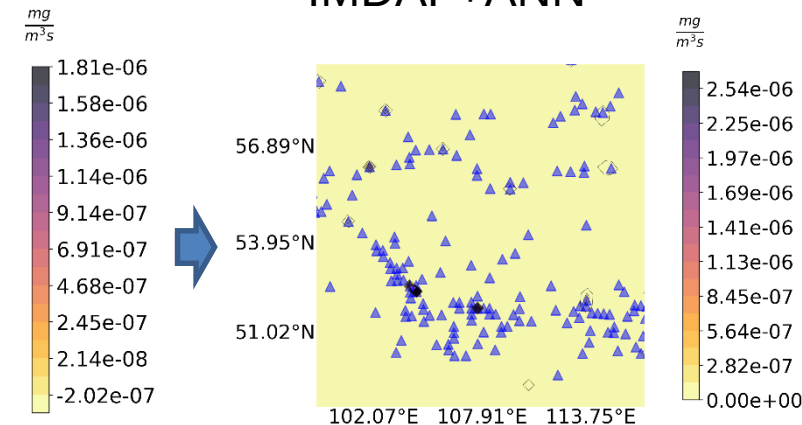
«True» source



IMDAF



IMDAF+ANN



- Гибридные алгоритмы, сочетающие алгоритм на основе операторов чувствительности и методы машинного обучения позволяют уточнять решение за счет включения априорной информации.

Оценивание траекторий и скоростей подъёма дымовых шлейфов от труб ТЭЦ по спутниковым снимкам

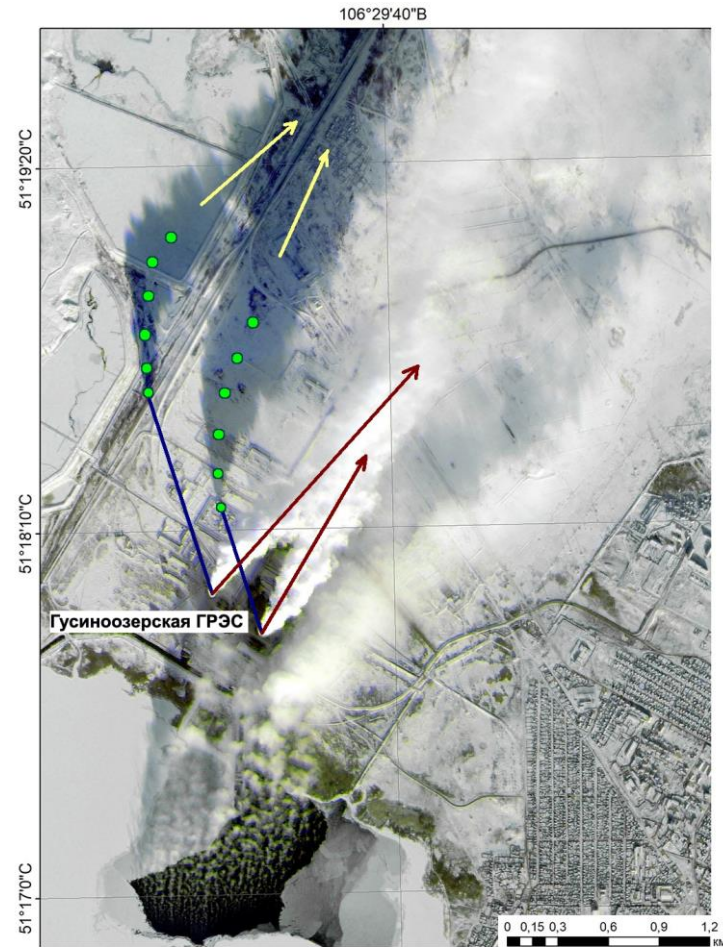


Рис. 1 - Фрагмент спутникового снимка окрестностей **Гусиноозёрской ГРЭС** с ИСЗ «Конопус-В» № 3 от 20.12.2018 03:40 UTC

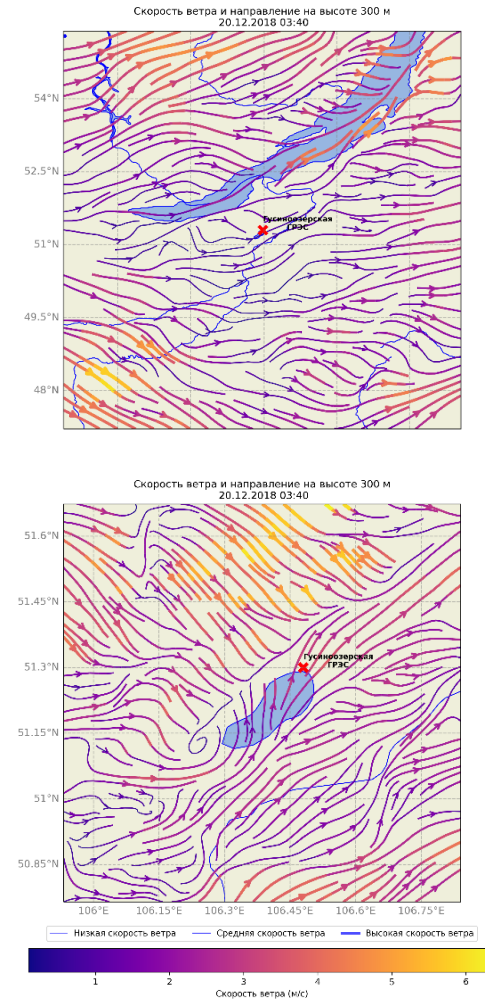


Рис. 2 – Рассчитанные по модели **WRF** поля ветра над территорией **БПТ** и в районе оз. **Гусиное** 20 декабря 2018 г. на высоте 300 м

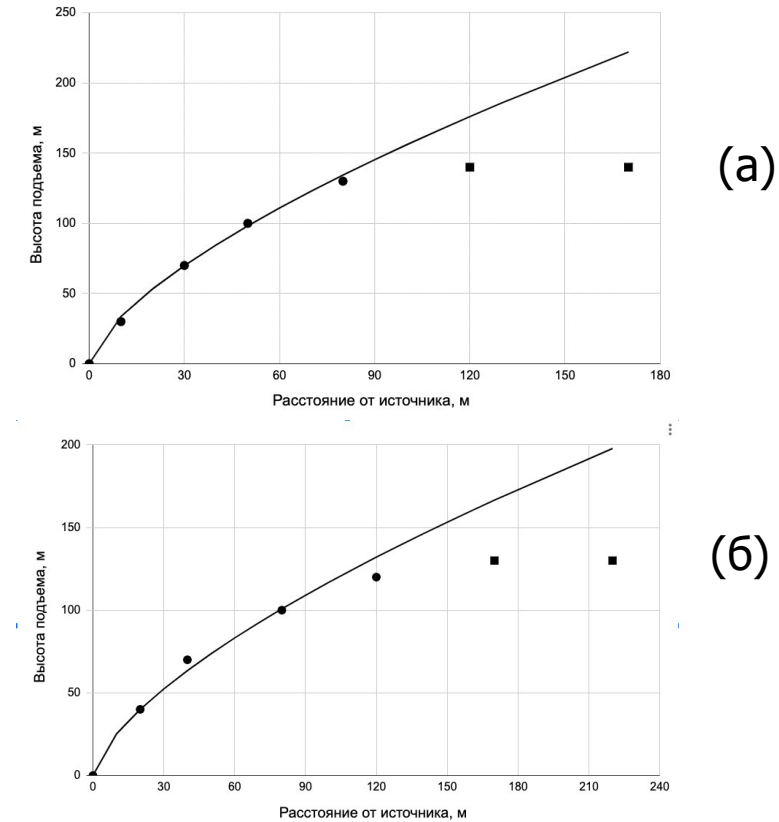


Рис. 3 - Численно восстановленные траектории дымовых шлейфов от 330 метровой (а) и 190 метровой (б) труб **Гусиноозёрской ГРЭС**

Оценивание траекторий и скоростей подъёма дымовых шлейфов от труб ТЭЦ по спутниковым снимкам



В рамках закона «**двух третей**», полученного из соображений подобия и размерности, траектория подъёма дымового шлейфа описывается соотношением

$$z = B x^{2/3} \quad B = C \frac{F^{1/3}}{u} \quad F = g w_0 R^2 \left(1 - \frac{T_a}{T_c} \right) \quad (1)$$

F – параметр силы плавучести, ($\text{м}^4/\text{с}^3$); u – средняя скорость ветра в слое распространения примеси, ($\text{м}/\text{с}$); w_0 – скорость газовой смеси на выходе из трубы, ($\text{м}/\text{с}$); R – радиус трубы, (м); T_c – температура смеси, ($^\circ\text{K}$); T_a – температура окружающего воздуха ($^\circ\text{K}$);

Оценка параметра B проводится на основе (1) и положениям выбранных точек на оси шлейфа методом наименьших квадратов. Значение параметра B определяется, исходя из условия минимума следующего функционала

$$f(B) = \sum_{n=1}^N \left[z_n - B x_n^{2/3} \right]^2 \quad (2)$$

где x_n , z_n – измеренные координаты точек на оси дымового шлейфа, $n = 1, \dots, N$.

Вертикальная скорость подъёма шлейфа определяется по следующей формуле

$$w(z) = \frac{2}{3} u(z) B^{\frac{3}{2}} z^{-\frac{1}{2}} \quad (3)$$

Оценивание траекторий и скоростей подъёма дымовых шлейфов от труб ТЭЦ по спутниковым снимкам

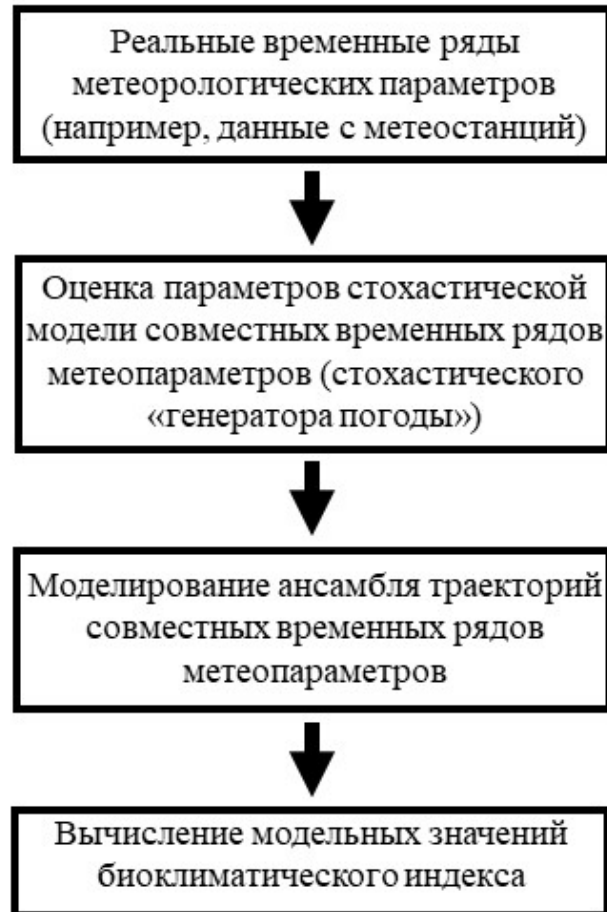


- С использованием соотношений, вытекающих из теории подобия и размерности, предложены методы **оценивания траекторий и скоростей подъёма** дымовых шлейфов от высотных труб тепловых станций по спутниковой информации и результатам моделирования циркуляционных процессов в атмосфере.
- Расчёты полей ветра и температуры воздуха были выполнены с помощью мезомасштабной численной модели **WRF**, что позволило детализировать вертикальное распределение скорости ветра в районах расположения объекта исследования. Анализ результатов моделирования показал, что модель **WRF**, адаптированная к территории **БПТ**, дает возможность получать физически обоснованные поля метеорологических величин высокого пространственного и временного разрешения.
- С использованием зимнего спутникового снимка проведена апробация предлагаемого подхода на примере выбросов дымовых смесей из труб **Гусиноозёрской ГРЭС**. Для определённых диапазонов расстояний от труб ГРЭС показан высокий уровень согласия наблюдаемых траекторий с их интерполяциями в рамках «закона 2/3».
- Проведение данного исследования представляется актуальным, поскольку трубы ТЭЦ относятся к дорогостоящему оборудованию. Внештатные режимы их функционирования могут привести к существенному экологическому и экономическому ущербу. В условиях ограниченности информации о динамических и тепловых характеристиках исходящих дымовых смесей результаты выполненных исследований могут быть использованы для контроля и оптимизации параметров выбросов при эксплуатации дымовых труб тепловых станций.

Разработка, численная реализация, верификация и сравнение стохастических моделей пространственно-временных полей биоклиматических индексов

«Генератор» разработан в 2024 г.

Подход №1



Подход №2



В рамках проекта разрабатываются оба подхода для моделирования временных рядов и пространственно-временных полей трёх биоклиматических индексов:

- индекса холодного стресса,
- эквивалентно-эффективной температуры
- универсального индекса теплового комфорта (UTCI).

Рис.1. Блок-схемы 2 подходов к моделированию рядов биоклиматических индексов.

Разработка, численная реализация, верификация и сравнение стохастических моделей пространственно-временных полей биоклиматических индексов

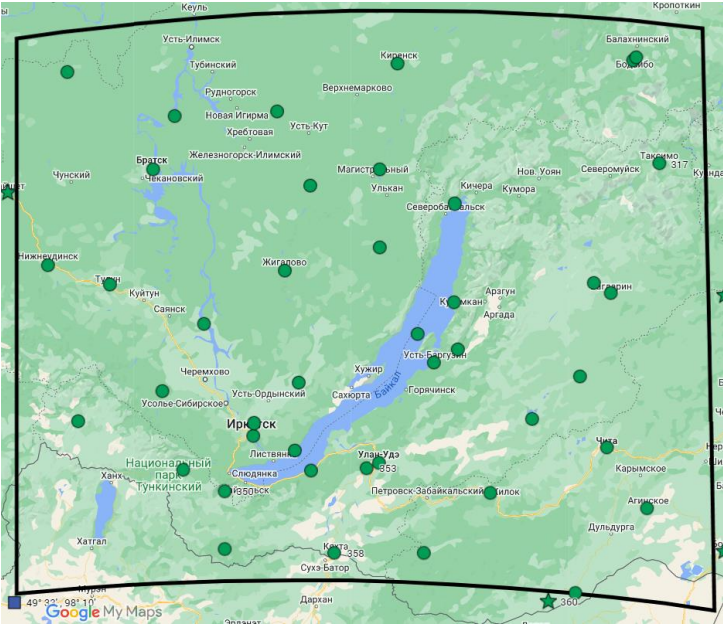


Рис. 2. Расположение метеорологических станций на Байкальской природной территории и в прилегающих к ней районах (фрагмент карты Google).

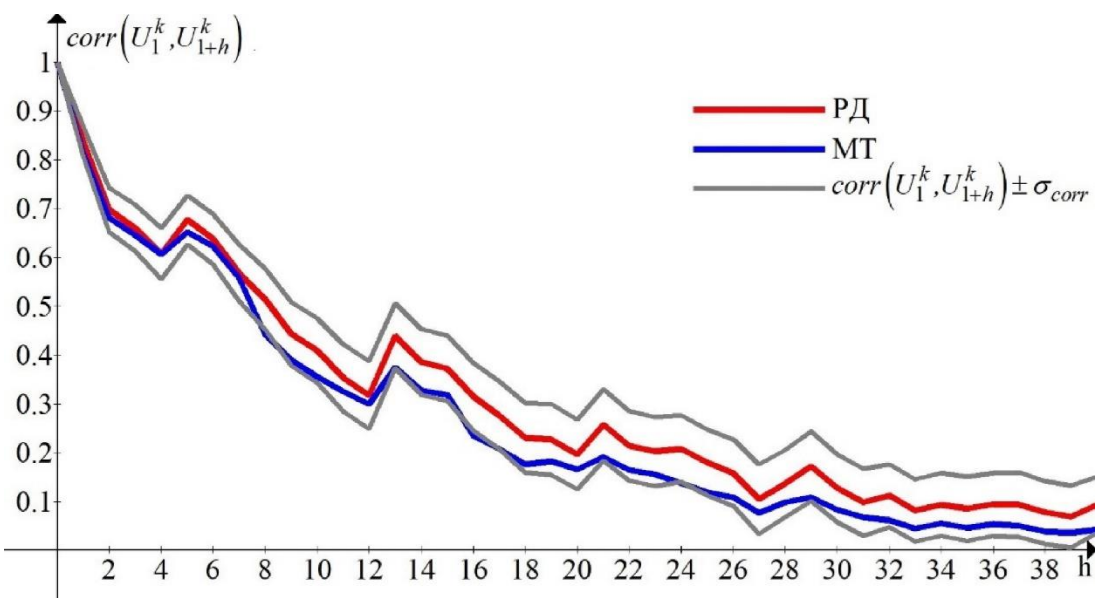


Рис. 2. Оценки коэффициентов корреляции универсального индекса теплового комфорта (UTCI). Иркутск, 3-12 января. РД-реальные данные, МТ- модельные траектории. Модель на основе «генератора погоды»

$[a, b)$	$n = 1$		$n = 2$	
	РД, $P_5(n, a, b) \pm \sigma_{P_5}$	МТ	РД, $P_5(n, a, b) \pm \sigma_{P_5}$	МТ
$[-13, 0)$	0.032 ± 0.015	0.032	0.018 ± 0.011	0.021
$[-27, -13)$	0.573 ± 0.048	0.555	0.482 ± 0.046	0.465
$[-40, -27)$	0.391 ± 0.048	0.393	0.296 ± 0.042	0.272
$[-\infty, -40)$	0.005 ± 0.011	0.019	0.000 ± 0.006	0.006

Таб. 1. Оценки вероятностей попадания UTCI в интервалы комфортности $[a,b)$ в течение n сроков измерений подряд, начиная с 0 ч (UTC)/ Иркутск, 3-12 января . Модель на основе «генератора погоды».

Заключение



- Развитие систем мониторинга химического состава атмосферы позволяет использовать данные для оперативной оценки и управления качеством воздуха.
 - На основе ансамблей решений сопряженных уравнений и операторов чувствительности развит подход к разработке численных алгоритмов усвоения данных. В частности, разработан гибридный алгоритм уточнения решений обратной задачи. Разработана технологическая цепочка для построения региональных сценариев обратного моделирования, включающая модель WRF-Chem.
- Трубы ТЭЦ относятся к дорогостоящему оборудованию. Внестатные режимы их функционирования могут привести к существенному экологическому и экономическому ущербу. В условиях ограниченности информации о динамических и тепловых характеристиках исходящих дымовых смесей результаты выполненных исследований могут быть использованы для контроля и оптимизации параметров выбросов при эксплуатации дымовых труб тепловых станций.
 - Разработаны методы оценивания траекторий и скоростей подъёма дымовых выбросов от труб тепловых станций с использованием спутниковой информации.
- Разработаны, численно реализованы и верифицированы стохастические модели пространственно-временных полей различных биоклиматических индексов на основе разработанных в 2024 г. «генераторов погоды».

Отчетные публикации 2025:

1. Рапута В. Ф., Леженин А. А., Ярославцева Т. В. Оценка влияния штилевых условий на загрязнение бенз(а)пиреном атмосферы города Читы. // Оптика атмосферы и океана. 2025. Т. 38. № 06. С. 493–499. DOI: 10.15372/AOO20250612.
2. Кузьминых Р. А., Рапута В. Ф., Леженин А. А., Градов В. С. Оценивание скоростей подъема дымовых шлейфов от труб ТЭЦ по спутниковым снимкам. // Оптика атмосферы и океана. 2025. Т. 38. № 08. С. 652–658. DOI: 10.15372/AOO20250808.

Спасибо за внимание!

Нелинейный «дифференцируемый черный ящик»

- Нелинейный оператор $H_{MO}^{(m)}[\varphi](x, y)$, соответствующий спутниковым измерениям прибора MODIS (9):

$$H_{MO}^{(m)}[\varphi](x, y) = H_{MODIS}(\varphi(x, y, \cdot, t^{(m)}); c^{(m)})$$

где H_{MODIS} – оператор, вычисляющий по вертикальному профилю концентраций примеси (одного из типов аэрозоля базы OPAC) $\varphi(x, y, z, t^{(m)})$ измеренную интенсивность приходящего излучения, $c^{(m)}$ – номер канала MODIS.

- на основе пакета RTTOV версии 13.2
- моделирует измеренную интенсивность излучения в каналах №№1-7 платформы Terra/MODIS с заданием на вертикальной сетке давлений концентрации всех типов аэрозоля базы OPAC (Optical Properties of Aerosols and Clouds)
- вариационные производные измеренных значений по значениям концентрации аэрозоля.

- Для сравнения используем линейный оператор интегральной концентрации аэрозоля («total-column»)

$$H_{TC}^{(m)}[\varphi](x, y) = \int_0^Z \varphi_{l(m)}(x, y, z, t^{(m)}) dz$$

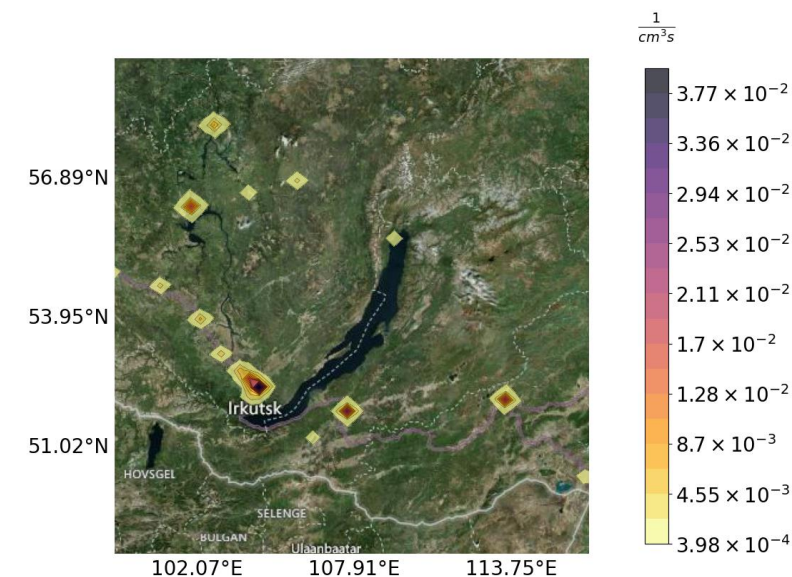
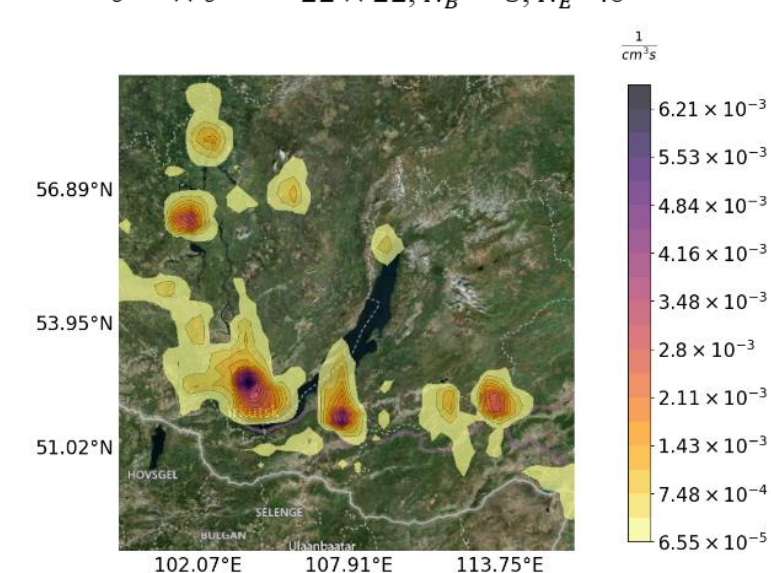
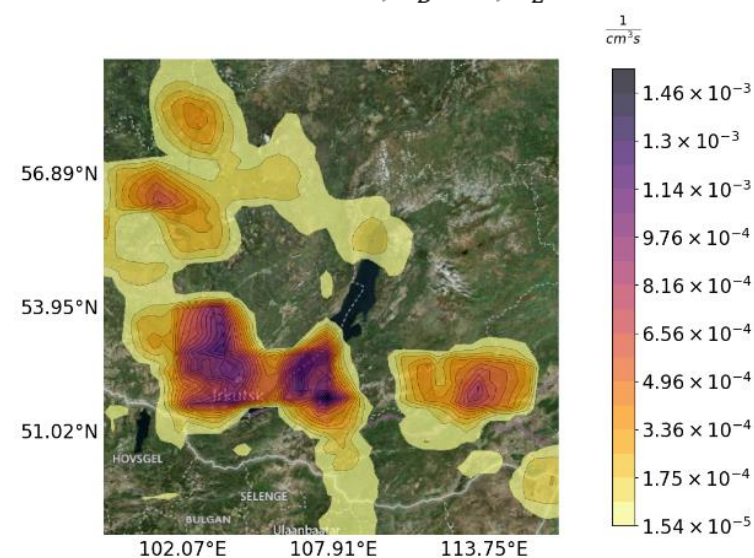
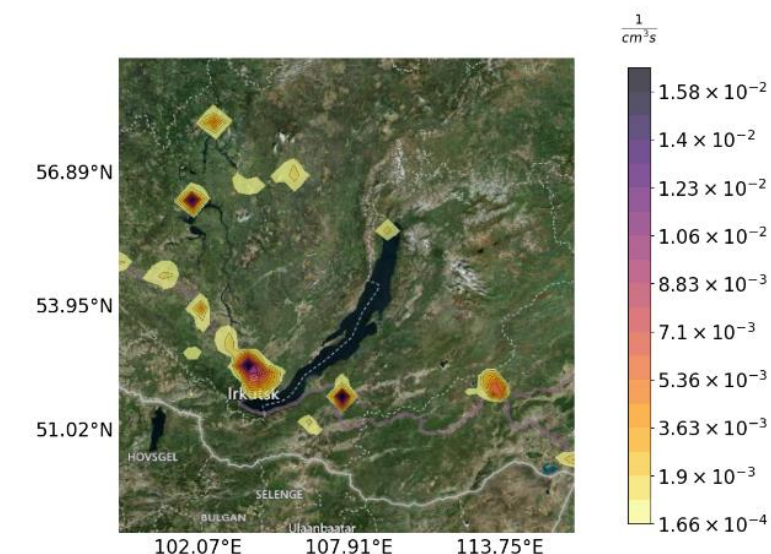
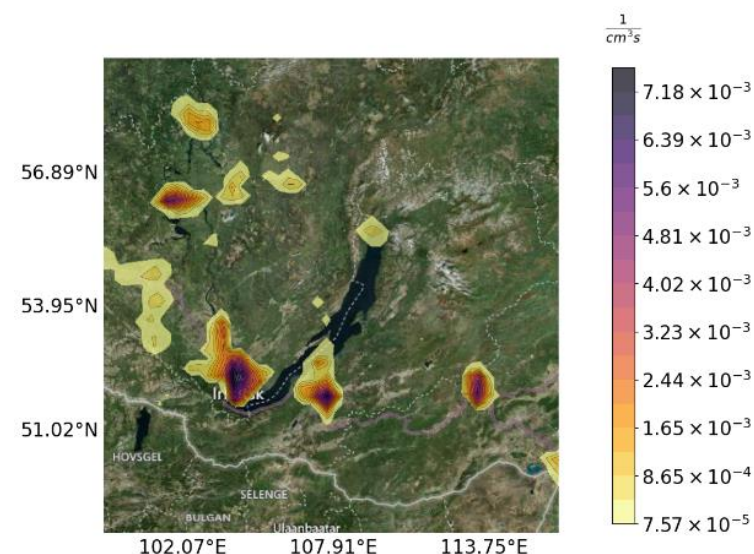
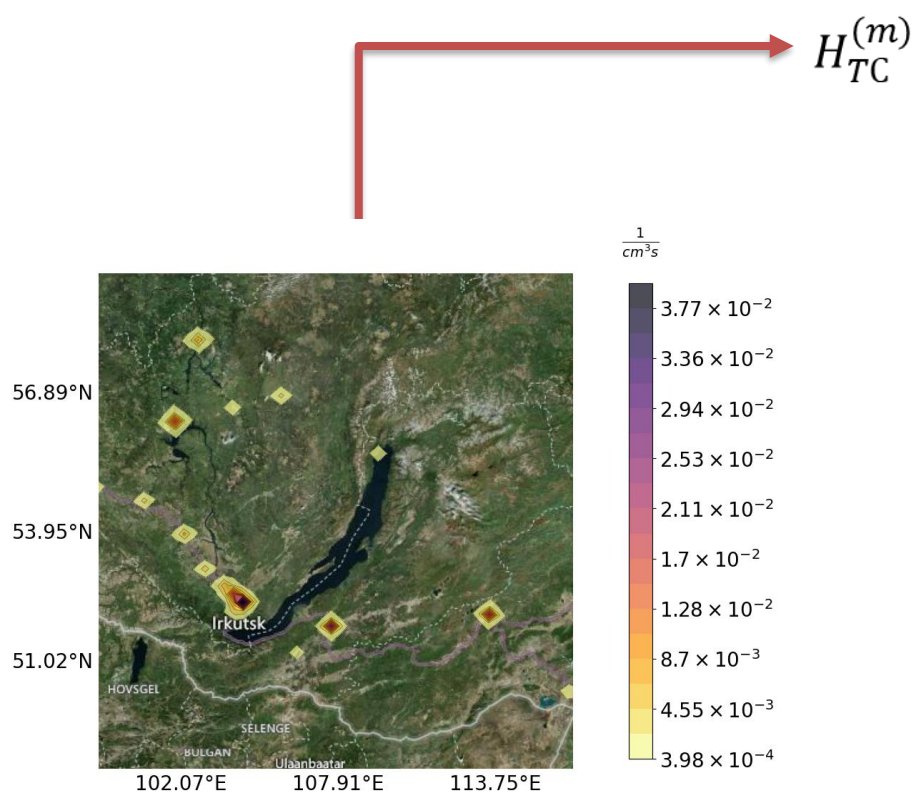


Рис.1 «Истинная» функция распределения источников сажи $r^{(*)}$

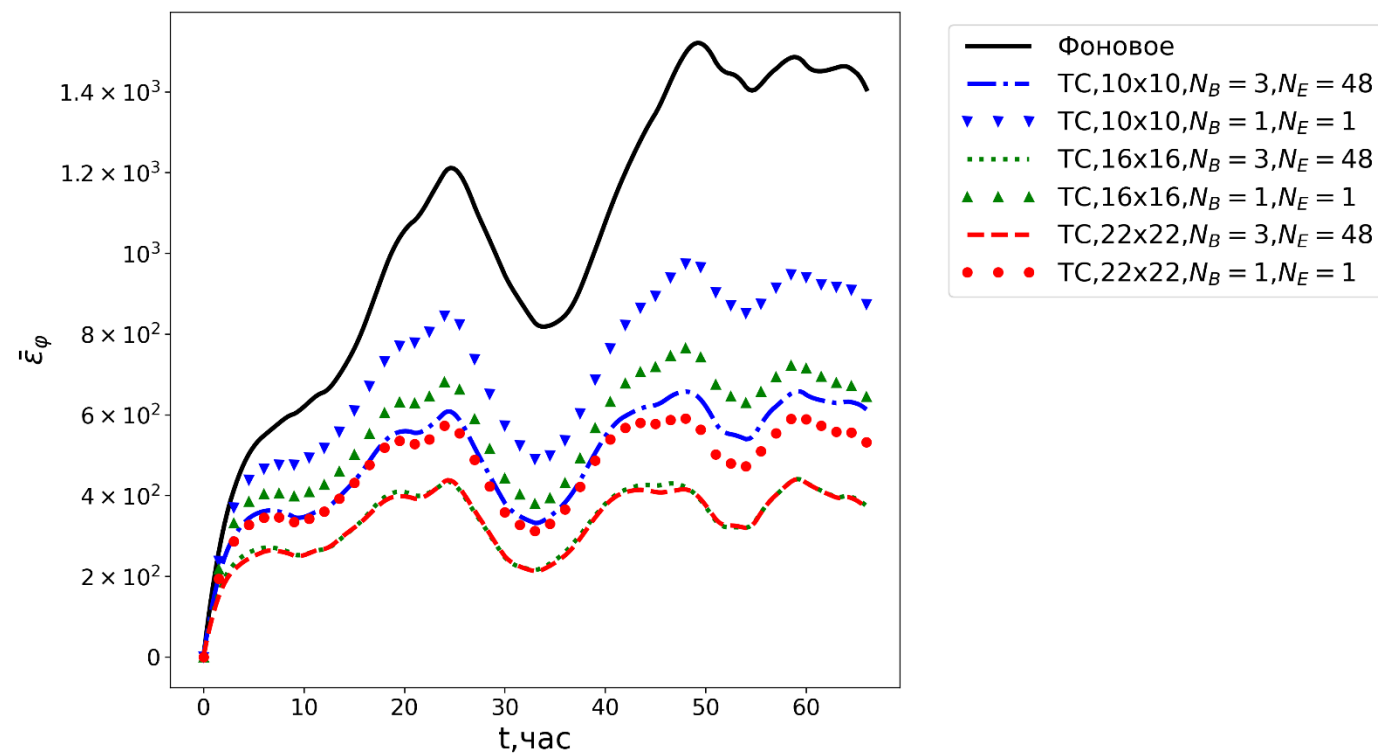
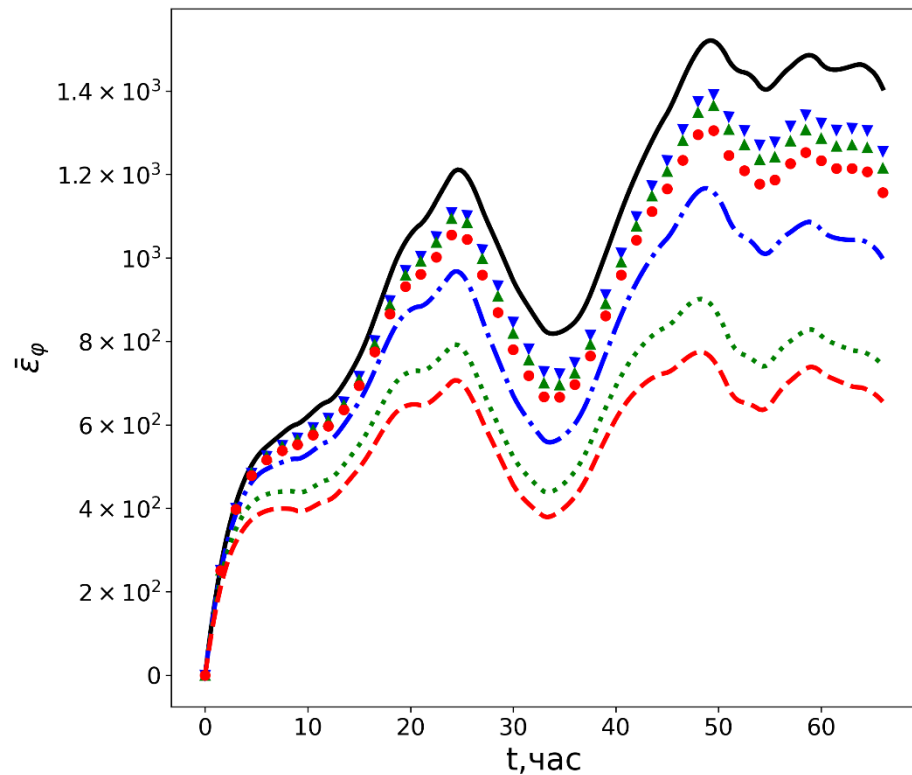
- Интервал: 66 часов с 12:00 23.07.2019
- Метеорология: COSMO
- Снимки каждые 24 часа
- Пассивная примесь («сажа»)

Результаты восстановления $r^{(*)}$ с «эпохами» и «батчами»



$H_{MO}^{(m)}$

Сравнение результатов восстановления полей концентраций



Нелинейные операторы наблюдений

«найти» «дано»

$$H(\varphi) = I \longrightarrow \langle \bar{\nabla} H[\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}](\varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}), h \rangle = \langle I^{(2)} - I^{(1)}, h \rangle \longrightarrow \langle \varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}, \bar{\nabla} H[\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}]^* h \rangle = \langle I^{(2)} - I^{(1)}, h \rangle$$

«дано в измерениях»

«найти»

$$L(\varphi) = q \longrightarrow \langle \bar{\nabla} L[\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}](\varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}), \psi \rangle = \langle q^{(2)} - q^{(1)}, \psi \rangle \longrightarrow \langle \varphi^{(2)} - \varphi^{(1)}, \bar{\nabla} L[\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}]^* \psi \rangle = \langle q^{(2)} - q^{(1)}, \psi \rangle$$

$$\text{Если } \bar{\nabla} L[\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}]^* \psi = \bar{\nabla} H[\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}]^* h \quad \text{то} \quad \langle I^{(2)} - I^{(1)}, h \rangle = \langle q^{(2)} - q^{(1)}, \psi \rangle$$

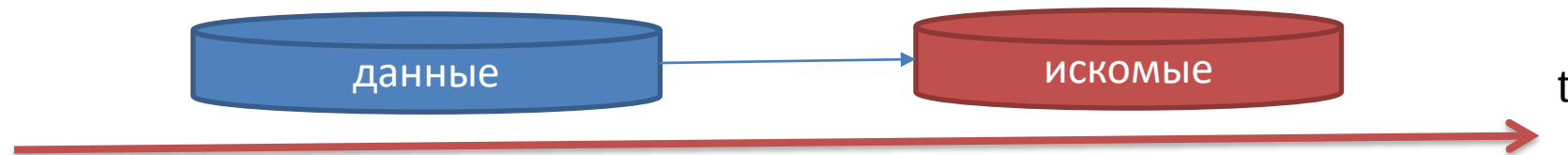
«сопряжённое уравнение» «соотношение чувствительности»

При нелинейном операторе наблюдений в «источниках» сопряженного уравнения появляются нелинейные операторы чувствительности обратной задачи обращения оператора измерений.

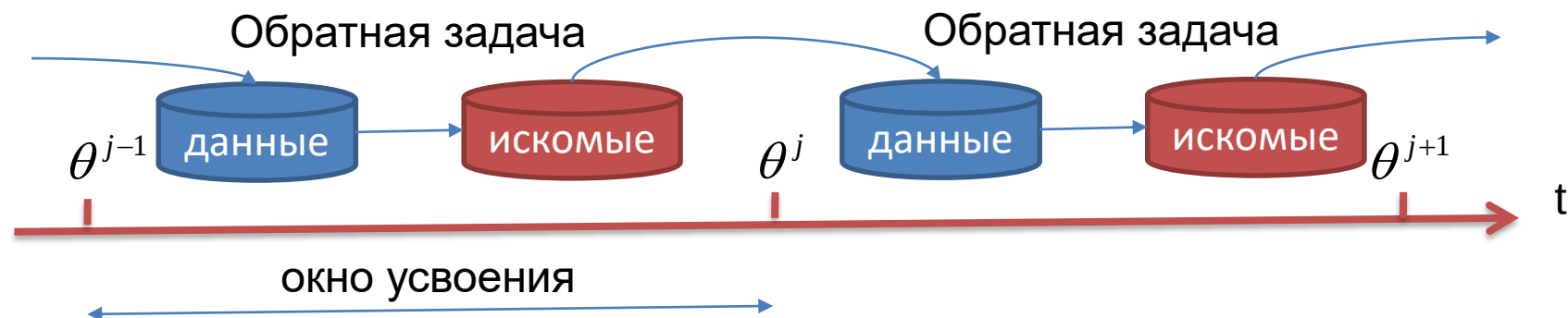
$$\text{Если } H \text{ линейный, то } \bar{\nabla} H[\varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}] = H$$

Декомпозиция «по данным»

Обратная задача



Задача усвоения данных



Декомпозиция обратной задачи с помощью «эпох» и «батчей»

