

ОПТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И БАЗЫ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ ОБ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЕ

УДК 519.6

Алгоритм восстановления вертикального распределения мощностей источников и стоков субстанции в пограничном слое атмосферы

П.Н. Антохин¹, А.В. Пененко², О.Ю. Антохина^{1*}

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

²Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
630090, г. Новосибирск, ул. Академика Лаврентьева, 6

Поступила в редакцию 23.01.2017 г.

Представлен алгоритм решения обратной задачи восстановления вертикального распределения мощности источника примеси с использованием конечного числа вертикальных профилей ее концентрации. Обратная задача решалась для модели переноса примеси. Особенностью алгоритма является то, что отсутствующая информация о временной динамике источника примеси восполняется применением метода, основанного на регуляризации Тихонова. Параметр регуляризации определяется с помощью решения вспомогательной обратной задачи с параметрическим заданием мощности искомого источника. Разработанный алгоритм протестирован как на синтетических, так и на реальных данных самолетных измерений. В численных экспериментах с реальными данными восстановлено вертикальное распределение мощности источника озона в пограничном слое атмосферы и нижней тропосфере.

Ключевые слова: образование озона, данные самолетного зондирования, обратная задача поиска источников, вариационный подход, регуляризация Тихонова; ozone generation, airborne sensing data, inverse source problem, variational approach, Tikhonov regularization.

Введение

Одна из важнейших задач исследования формирования газового состава и качества атмосферного воздуха — восстановление мощности и положения источников, влияющих на генерацию и сток газовых и аэрозольных компонент. Данная задача актуальна для мониторинга и охраны окружающей среды, в особенности при оценке мощности специфических и крупных площадных источников примеси. Практически невозможно измерить исключительно инструментальными средствами суммарную мощность таких источников эмиссий, как болота, свалки бытовых отходов, факелы нефтедобывающих скважин, города, лесные пожары и таких стоков газовых компонент и аэрозолей, как, например, леса. Можно оценить мощность источника в конкретной точке с помощью камерного метода измерений. Градиентные или пульсационные методы позволяют получить оценку в определенной окрестности точки измерений, площадь которой может меняться в зависимости от метеорологических условий. Используя только лишь математические методы решения обратных задач и результаты натуральных измерений, можно адекватно оценить интегральную мощность указанных источников.

* Павел Николаевич Антохин (apn@iao.ru); Алексей Владимирович Пененко (a.penenko@yandex.ru); Ольга Юрьевна Антохина (olgayumarchenko@gmail.com).

Известны несколько способов решения задач поиска источников в зависимости от имеющейся априорной информации (обратных задач). Если предполагается, что источник точечный, то можно привлекать алгоритмы, предложенные в работе [1]. В случае распределенного источника применяются алгоритмы на основе сопряженных уравнений [2–6]. Использование инструментальных данных в качестве входных параметров модели вместо искусственных условий кажется, на первый взгляд, довольно логичным и не должно вызвать больших затруднений. Однако ряд сложностей, связанных с особенностями натуральных измерений, может стать препятствием к решению обратных задач такого рода. Во-первых, имеющихся данных может быть недостаточно для однозначного восстановления мощности источника и его локализации; в этом случае возникает проблема неединственности решения. Во-вторых, неизбежное присутствие «шума» (погрешностей) в рядах измерений приводит к существенным ошибкам в определении мощности и положения источника, т.е. к неустойчивости решения, что является другой важной проблемой.

Для устранения неединственности и повышения устойчивости решения обратной задачи определения мощности источника и его локализации применяются вариационные алгоритмы с различными методами регуляризации [7, 8]. Такие алгоритмы позволяют восполнить пробел в имеющихся данных инструментальных измерений, используя априорную

информацию о гладкости по времени функции источника. Это позволяет выбрать из множества решений обратной задачи физически более обоснованное. Степень «сглаживания» решения определяется параметром регуляризации, который требуется найти.

Цель настоящей работы — тестирование и численное исследование алгоритма восстановления вертикального распределения мощности источников (или стоков) субстанции по набору вертикальных профилей ее концентрации, разработанного на основе вариационного алгоритма решения обратной задачи. Новой является процедура подбора параметра регуляризации, исходя из опорного параметрического решения обратной задачи с заданной гладкостью. Разработанный алгоритм протестирован на модельных данных и данных самолетного зондирования вертикального распределения озона.

Процессы переноса и трансформации примесей в атмосфере развиваются в трехмерных областях (см., например, [9]). Для проверки алгоритма решения обратной задачи мы рассмотрим случай, когда синоптическая обстановка характеризуется полем ветра с малыми скоростями, т.е. соответствует штилевым условиям. Кроме того, предположим, что высотное зондирование происходит в районе с малым перепадом высот и однотипной растительностью, выделяющей одни и те же химические соединения. В этих условиях можно считать поле концентраций химических веществ горизонтально однородным и применять одномерную вертикальную модель (single column model). Процессы трансформации мы не будем рассматривать, причислив соответствующие слагаемые уравнений к искомым величинам.

Постановка задачи

Для постановки обратной задачи сначала сформулируем прямую задачу, которая моделирует связь источника или стока рассматриваемого вещества с его полями концентрации. Определим прямоугольную пространственно-временную область $\Omega_T = (0, Z) \times (0, T)$ ($Z, T \in \mathbb{R}$, $Z > 0$, $T > 0$) и диффузионную модель вертикального распределения химических веществ в атмосфере

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + f, \quad (z, t) \in \Omega_T; \quad (1)$$

$$-\mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \beta_L \varphi = \alpha_L, \quad z = 0, \quad t \in (0, T); \quad (2)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \beta_R \varphi = \alpha_R, \quad z = Z, \quad t \in (0, T); \quad (3)$$

$$\varphi = \varphi^0, \quad t = 0, \quad z \in (0, Z), \quad (4)$$

где z — высота; t — время; $\varphi(z, t)$ — функция состояния, описывающая поле концентраций рассматриваемого химического вещества; $\mu(z, t)$ — коэффициент турбулентной диффузии; $\alpha_L(t)$, $\alpha_R(t)$ — априорные значения источников на границах области; β_L , β_R — заданные константы; $f(z, t)$ — функция объемного источника или стока (в зависимости от

знака); $\varphi^0(z)$ — начальное распределение концентраций. Прямая задача состоит в том, чтобы определить f из (1)–(4) по известным α_L , α_R , μ , φ^0 .

Предположим, что все необходимые условия согласования выполнены, коэффициенты и параметры обладают достаточной гладкостью и прямая задача имеет единственное решение, для которого в любой момент времени $\tilde{t} \in (0, T)$ единственным образом определена функция $\varphi(z, \tilde{t})$ такая, что $\int_0^Z \varphi^2(z, \tilde{t}) dz < \infty$

и все дальнейшие выкладки имеют смысл. Более подробные исследования по вопросам существования обобщенных и классических решений краевых задач для параболических уравнений можно найти в [10, Главы 3 и 4].

Пусть в нашем распоряжении имеется M вертикальных профилей концентрации примеси (озона) $I_m(z)$, полученных в ходе самолетного зондирования на отрезке высот (Z_{\min}, Z) ($Z_{\min} \in (0, Z)$ — минимальная высота полета самолета), в моменты времени $\bar{\omega}_t = \{0 < \bar{t}_1 < \dots < \bar{t}_M < T\}$. В результате натурных измерений получают дискретные данные, которые затем кусочно-линейно дополняются до функций $I_m(z)$ на отрезках (Z_{\min}, Z) . Связь этих данных с функцией состояния $\varphi(z, t)$ запишется в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varphi(z, \bar{t}_m) &= I_m(z) + \delta I_m(z), \quad z \in (Z_{\min}, Z), \\ \bar{t}_m &\in (0, T), \quad m = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $\delta I_m(z)$ — погрешности измерений и интерполяции. Известна оценка погрешности $\sum_{m=1}^M \|\delta I_m\|_{L_2(Z_{\min}, Z)}^2 = \delta_I^2$. В качестве начальных данных

$\varphi^0(z)$ взяты данные измерений $I_0(z)$, $z \in (0, Z)$ на взлете самолета, согласованные с краевыми условиями и условиями гладкости начальных данных. Обратная задача состоит в том, чтобы определить f из (1)–(5) по известным I , α_L , α_R , μ , φ^0 .

В работах, посвященных обратным задачам, встречаются их постановки, в которых рассматриваются два измеренных профиля концентрации примеси — начальный и конечный. Они называются постановками с финальным переопределением. В частном случае, когда коэффициент диффузии примеси μ зависит только от пространственной координаты z , известны оценки скорости сходимости оптимизационного метода по функционалу без регуляризатора [11]. В [12–15] обсуждаются аналогичные постановки, где источник разыскивается в виде $f(z, t) = h(z)g(z, t) + s(z, t)$, где функции $g(z, t)$, $s(z, t)$ известны и подчиняются определенным условиям. Существуют утверждения о разрешимости такой обратной задачи [12] (при коэффициентах уравнения, зависящих от пространства и времени). Разрешимость задачи, единственность и устойчивость решения утверждаются в [13, 14] в случае, когда скорость переноса примеси ненулевая, а коэффициенты уравнения зависят только от пространственной координаты; точность оценок устойчивости обсуждается в [15]. Для постановки,

в которой источник разыскивается в виде $f(z, t) = h(z)g(z, t) + s(z, t)$ с известными $g(z, t)$ и $s(z, t)$, для получения единственного решения достаточно задать данные измерений в виде непрерывных временных рядов от значений концентрации в точках области или значений интегралов по некоторым пространственным областям [16]. Это возможно только при наличии большого количества измеренных профилей. Однако в нашем распоряжении есть значения, измеренные только в отдельные моменты времени.

Постановки, в которых источник задан в виде произведения двух неизвестных функций, зависящих соответственно от пространства или времени, сравниваются в [17]. В этой работе показано, что задача определения сомножителя, зависящего от времени, по данным финального переопределения является существенно некорректной, и применяется метод регуляризации на основе коллокации (т.е. поиск решения в виде линейной комбинации относительно небольшого количества функций).

Таким образом, можно сделать вывод, что задача определения источника $f(z, t)$ по набору вертикальных профилей концентрации примеси некорректна. Поэтому необходимо привлекать методы регуляризации для восполнения информации о временной динамике источника.

Численный алгоритм

Введем в области Ω_T равномерные сетки $\omega_z = \{0 = z_1 < \dots < z_N = Z\}$ и $\omega_t = \{0 = t^1 < \dots < t^{N_t} = T\}$ по пространству и времени с N и N_t узлами и с длинами интервалов Δz и Δt соответственно. Рассмотрим неявную схему [18, гл. 3, § 2, п. 9], аппроксимирующую краевую задачу (1)–(4):

$$\phi^j = \{\phi^0(z_i)\}_{i=1}^N, \quad j = 1; \quad (6)$$

$$\frac{\phi^j - \phi^{j-1}}{\Delta t} = L^j \phi^j + \mathbf{F}^j + \mathbf{f}^j, \quad j = 2, \dots, N_t, \quad (7)$$

где $\phi^j \in \mathbb{R}^N$ – вектор с элементами $\{\phi_i^j\}_{i=1}^N$; $\mathbf{f}^j \in \mathbb{R}^N$ – вектор с элементами $\{f_i^j\}_{i=1}^N$, $f_i^j = f(z_i, t^j)$;

$$(L^j \phi)_i = \begin{cases} \frac{\mu_{i+0,5}^j \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta z} - \beta_L \phi_i}{\delta z_i}, & i = 1; \\ \frac{\mu_{i+0,5}^j \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta z} - \mu_{i-0,5}^j \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta z}}{\delta z_i}, & 1 < i < N; \\ \frac{-\beta_R \phi_i - \mu_{i-0,5}^j \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta z}}{\delta z_i}, & i = N; \end{cases}$$

$$(\mathbf{F}^j)_i = \begin{cases} \frac{\alpha_L(t^j)}{\delta z_i}, & i = 1; \\ 0, & 1 < i < N; \\ \frac{\alpha_R(t^j)}{\delta z_i}, & i = N; \end{cases}$$

$$\mu_{i+0,5}^j = \mu\left(\frac{z_i + z_{i+1}}{2}, t^j\right), \quad \delta z_i = \begin{cases} \frac{\Delta z}{2}, & i = 1; \\ \Delta z, & 1 < i < N; \\ \frac{\Delta z}{2}, & i = N. \end{cases}$$

Решение разностной задачи (6), (7) для заданного $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^{N \times N_t}$ обозначим через $\phi[\mathbf{f}] \in \mathbb{R}^{N \times N_t}$. Будем считать, что моменты проведения измерений $\bar{\omega}_t$ находятся в некоторых узлах сетки ω_t . Индексы этих узлов обозначим через $\{\bar{j}_m\}_{m=1}^M$. На ограничениях, определяемых моделью (7), рассмотрим функционал Тихонова

$$J_\alpha(\mathbf{f}) = \sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N (\phi_i^{\bar{j}_m}[\mathbf{f}] - I_m(z_i))^2 \delta z_i + \alpha \Omega[\mathbf{f}], \quad (8)$$

$$i_{\min} = \min\{i \mid 1 \leq i \leq N, z_i > Z_{\min}\}.$$

Здесь $\alpha > 0$ – параметр регуляризации, а стабилизатор $\Omega[\mathbf{f}]$ выбран в виде

$$\Omega[\mathbf{f}] = \sum_{j=3}^{N_t} \left\langle \frac{\mathbf{f}^j - \mathbf{f}^{j-1}}{\Delta t}, \frac{\mathbf{f}^j - \mathbf{f}^{j-1}}{\Delta t} \right\rangle \Delta t, \quad (9)$$

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \sum_{i=1}^N a_i b_i \delta z_i.$$

Обозначим минимум этого функционала через \mathbf{f}_α . Добавление к функционалу невязки в (8) слагаемого стабилизатора (9) [8, гл. 2], содержащего оператор конечно-разностного дифференцирования по времени, позволяет контролировать гладкость получаемого источника по времени за счет выбора параметра регуляризации α . Верно следующее утверждение.

Лемма 1. Элемент градиента целевого функционала (8) на ограничениях (7), соответствующий f_i^j ,

$$(\nabla J_\alpha(\mathbf{f}))_i^j = \psi_i^j + \alpha(\nabla \Omega[\mathbf{f}])_i^j, \quad (10)$$

где ψ_i^j – решение сопряженной задачи

$$\begin{aligned} \psi^{N_t+1} &= 0, \\ (I_d - \Delta t L^j)^* \psi^j - \psi^{j+1} &= \mathbf{r}^j, \quad j = N_t, \dots, 1, \\ r_i^j &= \begin{cases} 2(\phi_i^{\bar{j}_m}[\mathbf{f}] - I_m(z_i)), & i_{\min} \leq i \leq N, j = \bar{j}_m; \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} \end{aligned}$$

(* обозначает взятие сопряженного относительно скалярного произведения $\langle \cdot, \cdot \rangle$ из (9) оператора; I_d – единичный оператор). Градиент стабилизатора

$$(\nabla \Omega[\mathbf{f}])_i^j = \frac{2}{\Delta t^2} \begin{cases} f_i^j - f_i^{j+1}, & j = 2; \\ -f_i^{j+1} + 2f_i^j - f_i^{j-1}, & j = 2, \dots, N_t - 1; \\ f_i^j - f_i^{j-1}, & j = N_t - 1. \end{cases} \quad (11)$$

Доказательство Леммы 1 получено с помощью техники сопряженных уравнений (аналогично [3, гл. 4], [11]) и вынесено в приложение. С известным градиентом для минимизации целевого функционала можно использовать алгоритмы, реализованные, например, в свободно-распространяемой библиотеке GSL [19]. В частности, в настоящей работе для минимизации использовался алгоритм Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS).

Основной вопрос при использовании регуляризации Тихонова – выбор параметра регуляризации. Если положить α равным нулю, то алгоритм будет находить эквивалентный источник завышенной мощности, но действующий в небольшой временной окрестности точки получения очередного профиля. Если в классической теории параметр подбирается, исходя из уровня погрешности в наблюдениях и модели, то в нашем случае он необходим для сохранения физического смысла решения, предполагающего независимость процесса образования субстанции от времени проведения самолетного зондирования. В предположении, что источник отдален от места наблюдения, ошибку восстановления источника можно уменьшить, скорректировав «освещенность» [6]. В нашем же случае образование (или распад) субстанции может происходить непосредственно в точке наблюдения.

Метод на основе параметрического задания источника с последующим поиском небольшого количества параметров также позволяет восполнить недостаток информации о его изменении во времени и в явном виде установить его гладкость. Однако в этом случае решение оказывается более чувствительно к выбору параметризации. Рассмотрим следующий параметрический вид источника:

$$f[\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}]_i^j = h_i + H_i e^{-(\sigma^2 t^j + \hat{t})^2}, \quad (12)$$

где константа σ^2 задана, а векторы $\bar{h}, \bar{H} \in \mathbb{R}^N$ и константу $\hat{t} \in \mathbb{R}$ требуется определить. Эти параметры можно найти, минимизируя целевой функционал

$$\tilde{J}(\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}) = J_0(f[\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}]) \quad (13)$$

градиентным методом.

Лемма 2. Градиент функционала \tilde{J} задается соотношениями

$$\nabla_{h_i} \tilde{J}(\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}) = \sum_{j=2}^{N_t} (\nabla J_0(f[\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}]))_i^j; \quad (14)$$

$$\nabla_{H_i} \tilde{J}(\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}) = \sum_{j=2}^{N_t} (\nabla J_0(f[\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}]))_i^j e^{-(\sigma^2 t^j + \hat{t})^2}; \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\hat{t}} \tilde{J}(\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}) = \\ = \sum_{i=1}^N \sum_{j=2}^{N_t} (\nabla J_0(f[\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}]))_i^j H_i e^{-(\sigma^2 t^j + \hat{t})^2} (-2(\sigma^2 t^j + \hat{t})). \end{aligned} \quad (16)$$

Доказательство: по правилу дифференцирования сложной функции.

В методе регуляризации по Тихонову будем выбирать параметр регуляризации так, чтобы он обеспечивал решению гладкость, аналогичную решению на основе параметризации источника типа (12), используя следующий алгоритм.

1. Алгоритмом минимизации BFGS на основе градиента (14)–(16) минимизируем функционал $\tilde{J}(\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t})$, находя векторные параметры $\mathbf{h}^*, \mathbf{H}^*, \hat{t}^*$. Пусть этим параметрам соответствует источник $\mathbf{f}^* = f[\mathbf{h}^*, \mathbf{H}^*, \hat{t}^*]$.

2. Генерируем посредством решения прямой задачи $\phi[\mathbf{f}^*]$ с источником \mathbf{f}^* набор значений $\tilde{I}_i^m = \phi_i^m[\mathbf{f}^*]$, $m = 1, \dots, M$, $i = i_{\min}, \dots, N$.

3. Рассмотрим целевой функционал, аналогичный (8), где вместо данных измерений $I_m(z_i)$ используются значения \tilde{I}_i^m :

$$\hat{J}_\alpha(\mathbf{f}) = \sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N (\phi_i^m[\mathbf{f}] - \tilde{I}_i^m)^2 \delta z_i + \alpha \Omega[\mathbf{f}]. \quad (17)$$

Обозначим минимум этого функционала через \hat{f}_α .

Найдем параметр регуляризации α^* , для которого достигается минимум относительной ошибки восстановления f^* при минимизации функционала (17):

$$\begin{aligned} \hat{\delta}(\alpha) = \delta(\mathbf{f}^*, \hat{f}_\alpha) = \frac{\|\mathbf{f}^* - \hat{f}_\alpha\|_{L_2(\omega_z \times \omega_t)}}{\|\mathbf{f}^*\|_{L_2(\omega_z \times \omega_t)}} \rightarrow \min_{\alpha}, \\ \|\mathbf{x}\|_{L_2(\omega_z \times \omega_t)} = \sqrt{\sum_{j=2}^{N_t} \langle \mathbf{x}^j, \mathbf{x}^j \rangle \Delta t}. \end{aligned} \quad (18)$$

Поиск параметра α^* осуществляется методом золотого сечения.

4. Минимизируем функционал Тихонова $J_{\alpha^*}(\mathbf{f})$ (8) с найденным параметром регуляризации α^* и исходными данными измерений $I_m(z_i)$. Полученный минимум \mathbf{f}_{α^*} будем считать оценкой источника.

Численные эксперименты

В качестве сценария для численных экспериментов было выбрано 8 августа 2013 г., в течение которого выполнялось самолетное зондирование в фоновом районе Томской обл. над постом мониторинга парниковых газов недалеко от п. Березоречка (56°08' с.ш., 84°20' в.д.). Подробное описание измерительного комплекса на базе самолета Ан-2 приведено в [20]. Для прямого моделирования и решения обратной задачи необходимо было определить коэффициент турбулентной диффузии и скорость осаднения примеси на поверхность. Метеорологические поля для расчетов были получены с помощью мезомасштабной модели Weather Research and Forecasting with Chemistry (WRF-Chem) version 3.5.1 [21]. Коэффициент турбулентной диффузии μ рассчитыв-

вался на основе k -теории [22]. Скорость осаждения примеси, в нашем случае озона, β_L задавалась постоянной и равной 0,6 см/с. Кроме того, $\beta_R = 0$, $\alpha_L = \alpha_R = 0$. На шаге 1 алгоритма начальные значения для поиска векторных параметров \mathbf{h} , \mathbf{H} нулевые, начальное значение для поиска \hat{t} равно $-1,8$; $\sigma^2 = 0,0001$. Начальное значение для поиска источника на шагах 3 и 4 алгоритма выбиралось в виде $f[\mathbf{h}, \mathbf{H}, \hat{t}]$ с указанными выше начальными значениями параметров.

Прямое моделирование проводилось во временном интервале от 0 до 24 ч с шагом по времени 30 мин для высот от 0 до $Z = 3000$ м с шагом $\Delta z = 100$ м. Обратная задача решалась на аналогичной сетке.

Для проверки возможностей алгоритма восстановления источника были проведены три группы численных экспериментов. В *первой группе* экспериментов для генерации синтетических данных использовалась нестационарная одномерная модель (6), (7). Вначале определялся источник (задавалась его мощность, положение и зависимости его параметров от времени), затем проводилось прямое моделирование, из результатов прямого моделирования выбирались вертикальные профили концентрации с определенной дискретностью. Далее на основе описанного алгоритма решалась обратная задача и восстанавливался источник, который сопоставлялся с исходным.

Для проверки предложенного алгоритма восстановления вертикального распределения мощности источника вертикальные профили концентрации для функции состояния выбирались с различной дискретностью (1, 2, 4, 8, 12, 16) (например, дискретность 4 означает, что использовался каждый 4-й получасовой вертикальный профиль из прямого решения). Дополнительно были проведены расчеты для двух специальных случаев: первый случай (s1) – вертикальные профили концентрации выбирались в 8:00, 11:00, 15:00, 18:00; второй (s2) – вертикальные профили концентрации выбирались в 8:00, 12:00, 17:00.

В качестве тестового источника рассматривался комбинированный источник, пространственно-временная динамика мощности которого описывается двумерной функцией Гаусса

$$\bar{f}(z, t) = \frac{A_T A_Z}{2\pi\sigma_T\sigma_Z} e^{-\left(\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_T^2} + \frac{(z-z_0)^2}{2\sigma_Z^2}\right)}, \quad (19)$$

где $A_T = 0,3$ нмоль/(м³·с); $\sigma_T = 2$ ч; $t_0 = 15$ ч; $A_Z = 125$ м; $\sigma_Z = 50$ м; $z_0 = 300$ м. Точность восстановления источника оценивалось с помощью $\delta(\bar{f}|_{\omega_z \times \omega_t}, \mathbf{f}_\alpha^*)$ из (18), где $\bar{f}|_{\omega_z \times \omega_t}$ – известное точное решение обратной задачи \bar{f} в точках сетки $\omega_z \times \omega_t$, \mathbf{f}_α^* – результат работы алгоритма.

На рис. 1, а приведено распределение ошибки в зависимости от количества используемых вертикальных профилей измерений; на рис. 1, б показаны вертикальное распределение исходного источника и восстановленное с применением алгоритма.

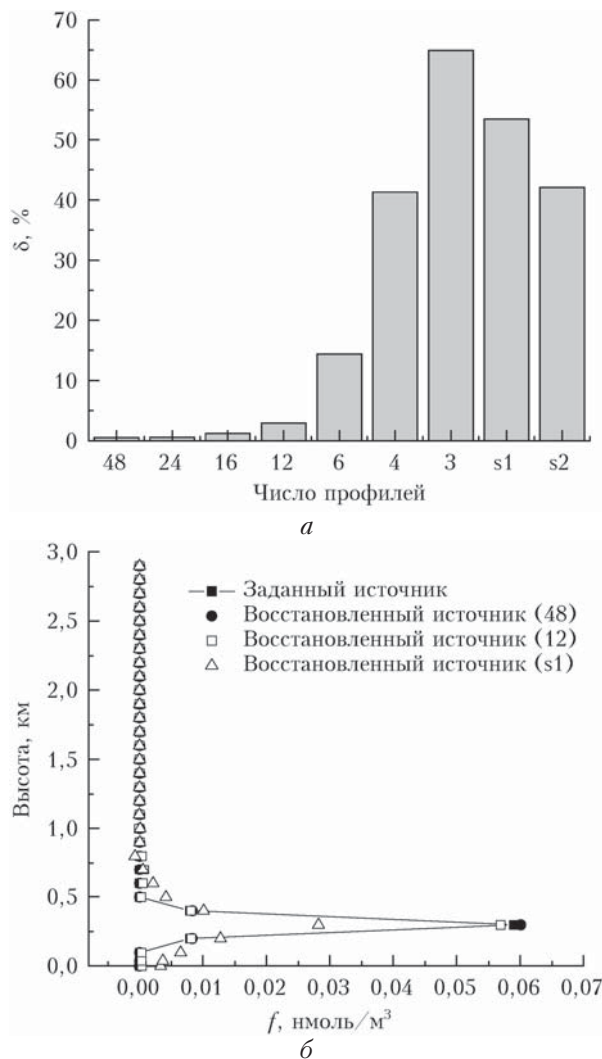


Рис. 1. Зависимость относительной ошибки восстановления вертикального распределения мощности источника (стока) от числа используемых вертикальных профилей измерений (а); сравнение вертикального распределения исходного источника (стока) и восстановленного на основе описанного алгоритма (б)

Из графиков рис. 1 следует, что при использовании всех смоделированных профилей относительная ошибка восстановления источника меньше 1%. При использовании алгоритма с ограниченным числом вертикальных профилей в ситуациях, приближенных к реальным условиям проведения эксперимента, ошибка может находиться в интервале от 35 до 70%. В частности, рис. 1, б показывает, что при уменьшении числа вертикальных профилей высота максимума источника восстанавливается корректно, а мощность занижается.

Во *второй группе* экспериментов для генерации профилей применялась модель WRF-Chem 3.5.1., а в *третьей группе* – реальные данные самолетных измерений. На рис. 2 приведены вертикальные распределения концентрации озона 8 августа 2013 г., полученные в результате численного моделирования WRF-Chem 3.5.1. (рис. 2, а) и в ходе выполнения самолетного зондирования (рис. 2, б).

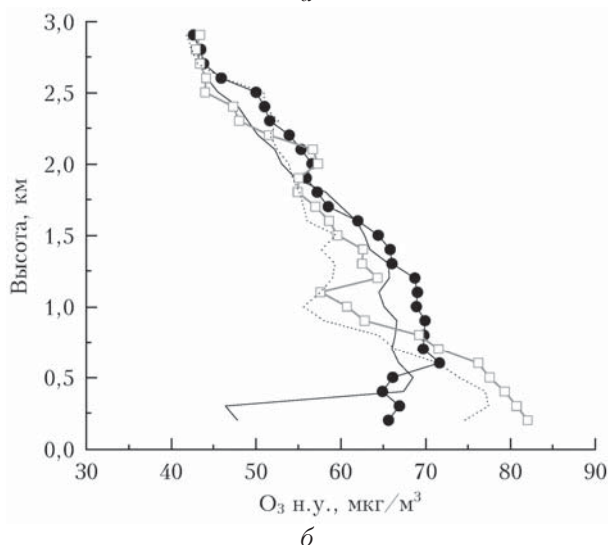
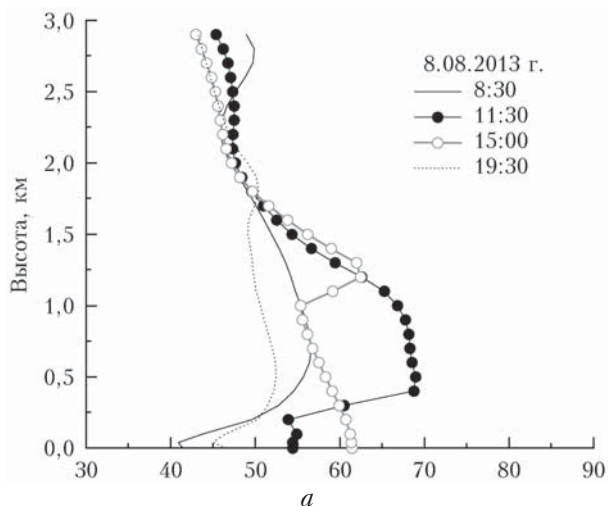


Рис. 2 Вертикальное распределение концентрации озона 8 августа 2013 г., полученное в ходе численного моделирования WRF-Chem 3.5.1. (а) и самолетного зондирования (б); н.у. — нормальные условия

Можно отметить качественное согласие между измеренными и модельными вертикальными профилями концентрации озона (рис. 2). Стоит, однако, заметить, что численное моделирование не отражает в полной мере динамику вертикального распределения озона в пограничном слое атмосферы.

На рис. 3 представлены вертикальные распределения мощности источника озона, восстановленные из данных численного моделирования WRF-Chem 3.5.1. (рис. 3, а) и самолетного зондирования (рис. 3, б) с использованием предложенного алгоритма.

Рис. 3 показывает, что восстановленные таким образом вертикальные распределения мощности источника озона совпадают качественно и количественно с учетом погрешности восстановления и различия во входных данных (рис. 2, а, б). Оба рисунка демонстрируют наличие максимума источника в нижней части пограничного слоя, где расположены основные источники газов-предшественников озона, что согласуется с ранее выполненными исследованиями [23].

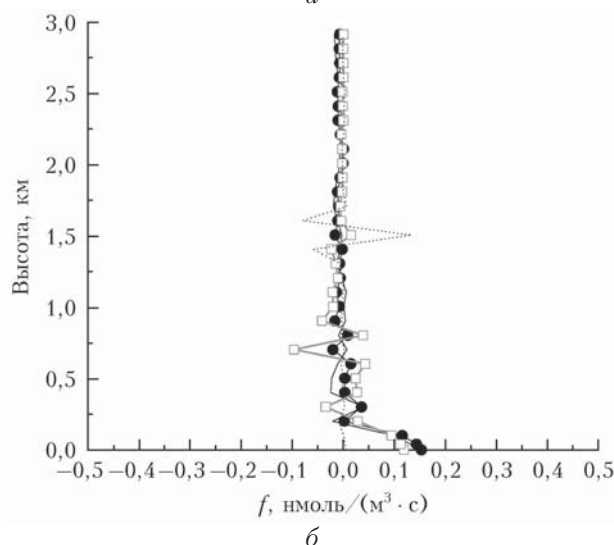
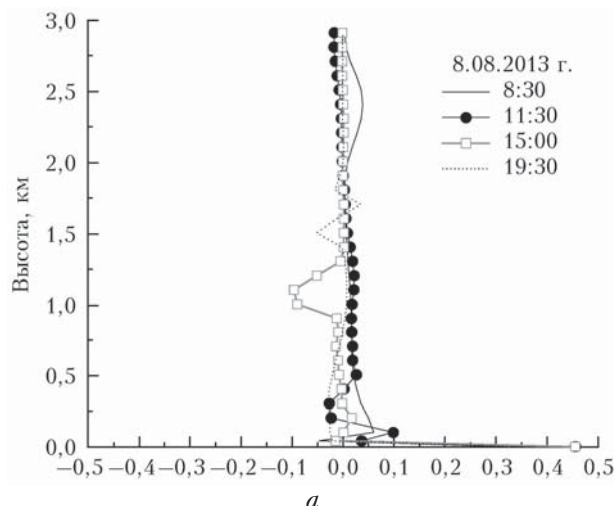


Рис. 3. Вертикальное распределение мощности источника (стока) озона, восстановленное из данных численного моделирования WRF-Chem 3.5.1. (а) и самолетного зондирования (б) с использованием предложенного алгоритма

Можно сделать вывод, что предложенный алгоритм применим для оценки мощности и локализации источников и стоков субстанции на основе данных натурных измерений.

Заключение

Предложен алгоритм восстановления вертикального распределения источников и стоков субстанции по данным самолетного зондирования на основе вариационного подхода к решению обратных задач и регуляризации Тихонова. В схеме регуляризации реализован выбор параметра регуляризации в предположении определенной гладкости решения. Параметр регуляризации разыскивается с помощью решения вспомогательной обратной задачи с параметрическим заданием искомого источника.

Результаты расчетов по предложенному алгоритму свидетельствуют, что при сделанных в работе предположениях данные измерений количественно согласуются со сценарием, когда фотохимическое

образование озона в пограничном слое атмосферы преобладает над его поступлением из вышележащих слоев на внутрисуточных масштабах времени в фоновом районе Западной Сибири [23]. В дальнейшем мы планируем использовать предложенный в исследовании алгоритм для обработки результатов самолетного зондирования, выполненного в другие сезоны, таких газовых примесей, как углекислый газ, метан, угарный газ.

Работа выполнена при поддержке программы Президиума РАН № 15, I.33П и П.2П/I.3-3, программы ОНЗ РАН, гранта МК-8214.2016.1, РФФИ (грант № 17-05-00374).

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Доказательство леммы 1.

Получим вспомогательное соотношение, связывающее вариацию функции состояния и источников. Скалярно умножим уравнение в вариациях для (7) на вектор $\psi^j \in \mathbb{R}^N$:

$$\sum_{j=2}^{N_t} \langle (I_d - \Delta t L) \delta \phi^j - \delta \phi^{j-1} - \Delta t \delta \mathbf{f}^j, \psi^j \rangle = 0.$$

Отсюда, используя определение сопряженного оператора,

$$\begin{aligned} \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^j, (I_d - \Delta t L)^* \psi^j \rangle - \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^{j-1}, \psi^j \rangle &= \\ &= \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \mathbf{f}^j, \psi^j \rangle \Delta t. \end{aligned} \quad (20)$$

Верно равенство

$$\begin{aligned} \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^{j-1}, \psi^j \rangle &= \sum_{j=1}^{N_t-1} \langle \delta \phi^j, \psi^{j+1} \rangle = \\ &= \langle \delta \phi^j, \psi^{j+1} \rangle \Big|_{j=1} + \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^j, \psi^{j+1} \rangle - \langle \delta \phi^j, \psi^{j+1} \rangle \Big|_{j=N_t}. \end{aligned}$$

Положим $\psi^{N_t+1} = 0$. Из постановки задачи $\delta \phi^1 = 0$. Следовательно,

$$\sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^{j-1}, \psi^j \rangle = \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^j, \psi^{j+1} \rangle. \quad (21)$$

Подставив (21) в (20), получим

$$\sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^j, (I_d - \Delta t L)^* \psi^j - \psi^{j+1} \rangle = \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \mathbf{f}^j, \psi^j \rangle \Delta t.$$

Если теперь положить

$$(I_d - \Delta t L)^* \psi^j - \psi^{j+1} = \mathbf{r}^j,$$

то

$$\sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^j, \mathbf{r}^j \rangle = \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \mathbf{f}^j, \psi^j \rangle \Delta t. \quad (22)$$

В силу линейности

$$\delta \phi = \phi[\delta \mathbf{f}].$$

Теперь рассмотрим вариацию первого слагаемого (8):

$$\begin{aligned} &\sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N (\phi_i^{j_m}[\mathbf{f} + \delta \mathbf{f}] - I_m(z_i))^2 \delta z_i - \\ &- \sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N (\phi_i^{j_m}[\mathbf{f}] - I_m(z_i))^2 \delta z_i = \\ &= \sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N \phi_i^{j_m}[\delta \mathbf{f}] (2(\phi_i^{j_m}[\mathbf{f}] - I_m(z_i))) \delta z_i + \\ &+ \sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N (\phi_i^{j_m}[\delta \mathbf{f}])^2 \delta z_i. \end{aligned}$$

Если выбрать

$$r_i^j = \begin{cases} 2(\phi_i^{j_m}[\mathbf{f}] - I_m(z_i)), & i_{\min} \leq i \leq N, j = \bar{j}_m; \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

то из (22) имеем

$$\sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N \phi_i^{\bar{j}_m}[\delta \mathbf{f}] (2(\phi_i^{\bar{j}_m}[\mathbf{f}] - I_m(z_i))) \delta z_i = \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \mathbf{f}^j, \psi^j \rangle \Delta t.$$

Рассмотрим вариацию стабилизатора

$$\begin{aligned} \Omega[\mathbf{f} + \delta \mathbf{f}] - \Omega[\mathbf{f}] &= \\ &= \sum_{j=3}^{N_t} \sum_{i=1}^N \left(\frac{(f_i^j + \delta f_i^j) - (f_i^{j-1} + \delta f_i^{j-1})}{\Delta t} \right)^2 \delta z_i \Delta t - \\ &- \sum_{j=3}^{N_t} \sum_{i=1}^N \left(\frac{f_i^j - f_i^{j-1}}{\Delta t} \right)^2 \delta z_i \Delta t = \sum_{j=3}^{N_t} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\delta f_i^j - \delta f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) \times \\ &\times \left(\frac{(2f_i^j + \delta f_i^j) - (2f_i^{j-1} + \delta f_i^{j-1})}{\Delta t} \right) \delta z_i \Delta t = \\ &= \sum_{j=3}^{N_t} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\delta f_i^j - \delta f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) 2 \left(\frac{f_i^j - f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) \delta z_i \Delta t + \\ &+ \sum_{j=3}^{N_t} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\delta f_i^j - \delta f_i^{j-1}}{\Delta t} \right)^2 \delta z_i \Delta t. \end{aligned} \quad (23)$$

Рассмотрим отдельно

$$\begin{aligned} &\sum_{j=3}^{N_t} 2 \left(\frac{\delta f_i^j - \delta f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) \left(\frac{f_i^j - f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) \Delta t = \\ &= \sum_{j=3}^{N_t} 2 \left(\frac{\delta f_i^j}{\Delta t} \right) \left(\frac{f_i^j - f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) \Delta t - \sum_{j=2}^{N_t-1} 2 \left(\frac{\delta f_i^j}{\Delta t} \right) \left(\frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} \right) \Delta t = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -2 \left(\frac{\delta f_i^j}{\Delta t} \right) \left(\frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta t} \right) \Delta t \Big|_{j=2} + \\
&+ \sum_{j=3}^{N_t-1} 2 \left(\frac{\delta f_i^j}{\Delta t} \right) \left(\frac{-f_i^{j+1} + 2f_i^j - f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) \Delta t + \\
&+ 2 \left(\frac{\delta f_i^j}{\Delta t} \right) \left(\frac{f_i^j - f_i^{j-1}}{\Delta t} \right) \Delta t \Big|_{j=N_t}.
\end{aligned}$$

Объединяя данное тождество с (23), получим выражение для вариации стабилизатора. Следовательно, вариация (8)

$$\begin{aligned}
J_\alpha(\mathbf{f} + \delta\mathbf{f}) - J_\alpha(\mathbf{f}) &= \sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta\mathbf{f}^j, \Psi^j + \alpha(\nabla\Omega[\mathbf{f}])^j \rangle \Delta t + \\
&+ \sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N (\phi_i^m[\delta\mathbf{f}])^2 \delta z_i + \sum_{j=3}^{N_t} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\delta f_i^j - \delta f_i^{j-1}}{\Delta t} \right)^2 \delta z_i \Delta t,
\end{aligned}$$

где выражение $(\nabla\Omega[\mathbf{f}])_i^j$ определено в (11). Отбрасывая слагаемые второго порядка малости (с учетом линейности уравнения в вариациях для (7)), получим требуемое выражение для градиента функционала (8).

1. *Badia A.El., Ha-Duong T., Hamdi A.* Identification of a point source in a linear advection-dispersion-reaction equation: Application to a pollution source problem // *Inverse Probl.* 2005. V. 21, N 3. P. 1121–1136.
2. *Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.
3. *Пененко В.В.* Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 352 с.
4. *Pudykiewicz J.A.* Application of adjoint tracer transport equation for evaluating source parameters // *Atmos. Environ.* 1998. V. 32, N 17. P. 3039–3050.
5. *Penenko V., Baklanov A., Tsvetova E.* Methods of sensitivity theory and inverse modeling for estimation of source parameters // *Fut. Gener. Comput. Syst.* 2002. V. 18, iss. 5. P. 661–671.
6. *Issartel J.P.* Rebuilding source of linear tracers after atmospheric concentration measurements // *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 2003. V. 3, iss. 6. P. 3173–3203. DOI: 10.5194/acp-3-2111-296 2003.
7. *Алифанов О.М., Антохин Е.А., Румянцев С.В.* Экстремальные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1988. 288 с.
8. *Васильев Ф.П.* Методы решения экстремальных задач. Задачи минимизации в функциональных пространствах, регуляризация, аппроксимация. М.: Наука, 1981. 400 с.
9. *Seinfeld J.H., Pandis S.N.* Atmospheric chemistry and physics. New-York: John Wiley & Sons, 2006. 1203 p.
10. *Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967. 736 с.

11. *Hasanov A.* Simultaneous determination of source terms in a linear parabolic problem from the final overdetermination: Weak solution approach // *J. Math. Anal. Appl.* 2006. V. 333, iss. 2. P. 766–779. DOI: 10.1016/j.jmaa.2006.08.018.
12. *Камынин В.Л.* Об однозначной разрешимости обратной задачи для параболических уравнений с условием финального переопределения // *Матем. заметки.* 2003. Т. 23, № 2. С. 217–227.
13. *Приленко А.И., Костин А.Б.* О некоторых обратных задачах для параболических уравнений с финальным и интегральным наблюдением // *Матем. сб.* 1992. Т. 183, № 4. С. 49–68.
14. *Приленко А.И., Соловьев В.В.* Теоремы разрешимости и метод Ротэ в обратных задачах для уравнения параболического типа. II // *Дифференц. уравнения.* 1987. Т. 23, № 11. С. 1971–1980.
15. *Kostin A.B.* Counterexamples in inverse problems for parabolic, elliptic, and hyperbolic equations // *Comput. Math. Math. Phys.* 2014. V. 54, iss. 5. P. 797–810.
16. *Pyatkov S.G., Safonov E.I.* Some inverse problems for convection-diffusion equations // *Вестн. ЮУрГУ. Сер. Матем. моделирование и программирование.* 2014. Т. 7, № 4. С. 36–50. <http://dx.doi.org/10.14529/mmp140403>.
17. *Hasanov A.* Identification of spacewise and time dependent source terms in 1D heat conduction equation from temperature measurement at a final time // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2012. V. 55, iss. 7–8. P. 2069–2080. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.12.009.
18. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 553 с.
19. *GNU Scientific Library Reference Manual Edition 2.2.1, for GSL Version 2.2.1.* [Electronic resource]. URL: https://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/ (last access: 25.10.2016).
20. *Антохин П.Н., Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Белан С.Б., Давыдов Д.К., Козлов А.В., Краснов О.А., Пестунов Д.А., Праслова О.В., Фофонов А.В., Иноуе Г., Machida T., Maksutov Sh.Sh., Shimoyama K., Sutoh H.* Применение самолета Ан-2 для исследования состава воздуха в пограничном слое атмосферы // *Оптика атмосф. и океана.* 2012. Т. 25, № 8. С. 714–720.
21. *Skamarock W.C., Klemp J.B., Dudhia J., Gill D.O., Barker D.M., Wang W., Powers J.G.* A description of the Advanced Research WRF version 3 [Electronic resource] // *NCAR Tech. Note. NCAR/TN-475+STR.* 2008. 113 p. URL: http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/user_guide_V3.5/ARWUsersGuideV3.pdf (last access: 20.01.2017).
22. *Troen I., Mahrt L.* A simple model of the atmospheric boundary layer; sensitivity to surface evaporation // *Bound.-Lay. Meteorol.* 1986. V. 37. P. 129–148.
23. *Антохин П.Н., Аршинова В.Г., Аршинов М.Ю., Белан Б.Д., Белан С.Б., Давыдов Д.К., Козлов А.В., Краснов О.А., Праслова О.В., Рассказчикова Т.М., Савкин Д.Е., Толмачев Г.Н., Фофонов А.В.* Суточная динамика вертикального распределения озона в пограничном слое атмосферы в районе Томска // *Оптика атмосф. и океана.* 2013. Т. 26, № 8. С. 665–672.

P.N. Antokhin, A.V. Penenko, O.Yu. Antokhina. **The algorithm for reconstructing the vertical distribution of sources and sinks of a substance in the atmospheric boundary layer.**

An algorithm is suggested for solution of the inverse problem of retrieving the vertical distribution of sources and sinks of a substance (ozone) using a finite number of vertical profiles of its concentration. The inverse problem is solved for the pollutant transport model. Missing information on the time dynamics of the source (sink) is compensated by applying a method based on the Tikhonov regularization. The regularization parameter is found from the solution of the auxiliary inverse problem with the parametric specification of an unknown source. The algorithm developed is tested on both synthetic data and real aircraft measurements. In numerical experiments with real data, the vertical distribution of an ozone source (sinks) in the atmospheric boundary layer and lower troposphere was retrieved.