

В.В. Пененко

Обратные задачи для многокомпонентного мониторинга и усвоения данных наблюдений

ИВМ и МГ СО РАН, г. Новосибирск

Поступила в редакцию 1.03.2000 г.

Рассматривается один из аспектов методики, относящейся к обратной задаче восстановления температуры и компонентного состава атмосферы по данным дистанционного зондирования со спутников и наблюдений приборами наземного базирования. Модели наблюдений, модели переноса радиации в задачах оптического зондирования атмосферы, модели термодинамики и переноса субстанций в атмосфере участвуют как необходимый набор средств, на которых базируется методика. Обсуждаются концептуальные вопросы постановки обратных задач, системной организации вычислительных алгоритмов и способов их реализации.

В последние годы в натуральных исследованиях природных процессов обозначилась тенденция к расширению набора специальных приборов, с помощью которых производятся наблюдения. При этом активно используются методы дистанционного зондирования [1–5] в сочетании с методами контактных измерений. В результате сбора данных к исследователям попадает разнородная информация, характеризующая с разных сторон один и тот же процесс. В этом случае возникает задача совместного использования этой информации и математических моделей с целью усвоения данных восстановления пространственно-временной структуры полей функции состояния, оценки параметров моделей и источников внешних воздействий. Технологию решения подобных задач дает разрабатываемая нами методика обратного моделирования [6].

Постановка задачи

Рассмотрим задачи, связанные с оценками характеристик атмосферы с использованием данных дистанционного зондирования и контактных наблюдений за компонентами функции состояния. В частности, ставится задача о нахождении распределения температуры и концентраций оптически активных субстанций в атмосфере.

Специфика методов дистанционного зондирования состоит в том, что их результаты в общем случае представляют собой значения некоторых функционалов на множестве функций состояния. Они, как правило, недоопределены по отношению к оцениваемым функциям, т.е. число наблюдений меньше числа внутренних степеней свободы моделей наблюдений в дискретном представлении. Под моделью наблюдений понимаем математическое описание преобразования, ставящего в соответствие функции состояния образ той величины, которая измеряется наблюдательным прибором. Возникает вопрос, как ввести дополнительные связи, чтобы уменьшить число внутренних степеней свободы и тем самым сделать процесс решения обратных задач для моделей наблюдений более корректным.

Для этих целей будем использовать в качестве связей математические модели исследуемых процессов и априор-

ные сведения об искомым функциях и оцениваемых параметрах. Естественно, деление на модели процессов и модели наблюдений – чисто условное. Например, модель гидротермодинамики в диагностических и прогностических задачах используется для описания формирования соответствующих процессов в атмосфере. А в обратных задачах усвоения данных наблюдений эта же модель помимо своей основной роли выступает в качестве пространственно-временного интерполянта, т.е. становится элементом модели наблюдений. Модели дистанционных наблюдений также можно использовать для описания процессов распространения излучения в атмосфере. Модель наблюдений можно считать квазистационарной, параметрически учитывающей время, если продолжительность каждого измерения мала по сравнению с шагом дискретизации, принятым в моделях процессов. В этом случае отсчет времени ведется по модели процесса, а результаты наблюдений приписываются к «модельному» времени.

Определим основные элементы постановки задачи: модели процессов, модели измерений и функционалы для организации методов моделирования и усвоения данных наблюдений. Для описания процессов и их математических моделей введем три типа объектов:

– функции состояния

$$\Phi = \{\varphi_i, i = \overline{1, n\varphi}\} \in Q(D_t, D_{tV}),$$

– параметры моделей

$$Y = \{Y_i, i = \overline{1, n\varphi}\} \in R(D_t, D_{tV}),$$

– сопряженные функции

$$\Phi^* = \{\varphi_i^*, i = \overline{1, n\varphi}\} \in Q^*(D_t, D_{tV}).$$

Функциональное пространство $Q^*(D_t, D_{tV})$ сопряжено с пространством функций состояния $Q(D_t, D_{tV})$; $R(D_t, D_{tV})$ – область допустимых значений параметров; D_t, D_{tV} – области изменения пространственно-временных координат $x,$

t и частот ν . Структуры функций Φ и Φ^* идентичны, хотя информационное содержание их различается. В наших построениях сопряженные функции являются обобщенными множителями Лагранжа. Они вводятся для построения вариационного принципа, чтобы исследовать поведение целевых функционалов в пространствах функций состояния и параметров. С позиций этого вариационного принципа численные модели ограничивают класс функций и связывают параметры и функции состояния. Часть параметров задается по принципу внешнего дополнения и рассматривается как входная информация. Она определяет число внешних степеней свободы. В обратных задачах некоторые параметры являются искомыми и находятся по измеренным данным о функции состояния. Так как они не увеличивают число внутренних степеней свободы в процессе моделирования, то их можно рассматривать как внутренние параметры модели. В качестве первого приближения для них задаются их априорные оценки по доступной фактической информации.

Модели процессов переноса тепла и оптически активных веществ в атмосфере

Рассмотрим только те из моделей, входящих в состав моделей климатической системы, которые непосредственно связаны с процессами распространения тепла, излучения и переноса оптически активных субстанций в атмосфере [7].

1. Модель термодинамики атмосферы

$$L_1(\Phi) \equiv \frac{\partial \pi \theta}{\partial t} + \text{div } \pi(\theta \mathbf{u} - \mu_\theta \text{grad } \theta) - \pi Q_\theta - \varepsilon_\theta = 0. \quad (1)$$

2. Модели переноса и трансформации влаги и оптически активных примесей в газовом и аэрозольном состояниях

$$L_2(\Phi) \equiv \frac{\partial \pi \varphi_i}{\partial t} + \text{div } \pi(\varphi_i \mathbf{u} - \mu_{\varphi_i} \text{grad } \varphi_i) + \pi R_i(\varphi) - \pi Q_{\varphi_i} - \varepsilon_{\varphi_i} = 0, \quad (2)$$

$$i = \overline{1, na},$$

где θ – потенциальная температура; \mathbf{u} – вектор скорости; $\mu_\theta, \mu_{\varphi_i}$ – коэффициенты турбулентного обмена; π – функция, зависящая от давления; φ_i – отношения смеси для характеристик атмосферной влаги и концентрации примесей в атмосфере; na – общее число субстанций; Q_θ, Q_{φ_i} – источники тепла, влаги и примесей; $(R_i(\varphi))_i$ – операторы, описывающие процессы трансформации; $\varepsilon_\theta, \varepsilon_{\varphi_i}$ – функции, учитывающие ошибки и меру неопределенностей моделей процессов. Функции θ и $\varphi_i, i = \overline{1, na}$, включаются в число компонентов функции состояния Φ , а $\mu_\theta, \mu_{\varphi_i}, Q_\theta, Q_{\varphi_i}$ – в компоненты вектора параметров \mathbf{Y} .

Модели дистанционных наблюдений

1. Модель расчета спектральной интенсивности $I_{1\nu}$, измеряемой со спутника [1]:

$$L_3(\Phi) \equiv I_{1\nu} - B_\nu[T(1)] \tau(\nu, 1) - \int_0^1 B_\nu[T(\xi)] \frac{\partial \tau(\nu, \xi)}{\partial \xi} d\xi - \varepsilon_{I1} = 0, \quad (3)$$

где $B_\nu(T) = a\nu^3 [\exp(b\nu/T) - 1]^{-1}$ – функция Планка, зависящая от частоты ν и температуры $T(\xi)$; a и b – заданные постоянные; $\xi = p/p_s$ – вертикальная координата; p – давление; p_s – приземное давление; $\tau(\nu, \xi)$ – функция пропускания слоя атмосферы от эффективной верхней границы до уровня ξ .

2. Модель дистанционного зондирования длинноволнового излучения со спутников [4]:

$$L_4(\Phi) \equiv \begin{cases} I_{2\nu}(\Phi) = \int_0^h dz \int_0^\infty d\nu \int_{-1}^1 \chi_n(\mathbf{x}, t) \eta d\mu, & (4) \\ \mu \frac{\partial \eta}{\partial z} + \alpha_\nu \eta - 0,5 \int_{-1}^1 \eta \alpha_{S\nu} \gamma_\nu(\mu, \mu') d\mu' - f_\nu - \varepsilon_{I2} = 0, & (5) \end{cases}$$

где $\mu = \cos \vartheta$, ϑ – высотный угол; η – интенсивность излучения с частотой ν ; h – эффективная верхняя граница атмосферы; $\gamma(\mu, \mu')$ – индикатриса рассеяния; $\chi_n(\mathbf{x}, t)$ – заданная функция, характеризующая условия измерения излучения $I_{2\nu}$; функция источника

$$f_\nu = S_\nu \delta(\mu - \mu_\odot) \delta(z - h) \mu_\odot + 0,5 \alpha_{c\nu} B_\nu(T), \quad (6)$$

S_ν – спектр солнечного излучения; $\alpha_\nu = \alpha_{S\nu} + \alpha_{c\nu}$, $\alpha_{S\nu}, \alpha_{c\nu}$ – коэффициенты рассеяния и поглощения; $\mu_\odot = \cos \vartheta_\odot$, ϑ_\odot – высота Солнца.

Для замыкания этой модели задаются краевые условия. На верхней границе предполагается, с учетом вида функции источников (6), отсутствие приходящего извне излучения. На нижней границе принимается условие диффузного отражения излучения от земной поверхности с учетом ее собственного излучения.

Для вычисления функционала $I_{2\nu}$ используется вариационный принцип с множителями Лагранжа, позволяющий построить для него соотношения чувствительности и в линейном случае исключить непосредственное вычисление функции η из решения второго уравнения (5) при соответствующих краевых условиях.

3. Модель расчета яркостных температур. Для случая наземного дистанционного зондирования атмосферного радиоизлучения в микроволновых окнах прозрачности эту модель можно использовать в виде [5]:

$$L_5(\Phi) \equiv T_{b\nu} - \int_0^H T(l) \gamma_\nu(l) \exp \left\{ - \int_0^l \gamma_n(l') dl' \right\} dl - \varepsilon_b = 0, \quad (7)$$

где $T_{b\nu}$ – яркостная температура; $\gamma_\nu(l)$ – коэффициент поглощения микроволнового излучения на частоте ν ; T – температура атмосферы; l – обобщенная вертикальная координата, зависящая от высоты над поверхностью Земли, коэффициента преломления и зенитного угла зондирования; H – высота атмосферы.

4. Модель лазерного зондирования атмосферы. Для примера возьмем уравнение лазерного зондирования в форме [3]:

$$L_6(\Phi) \equiv S(r) - Cb(r) \alpha(r) \exp \left\{ - 2 \int_0^r \alpha(r') dr' \right\} - \varepsilon_S = 0, \quad (8)$$

где C – константа калибровки лазера; $S(r)$ – лидарная S -функция, представляющая собой величину измеренного сигнала, скорректированного на квадрат расстояния и геометрическую функцию лидара; $b(r)$ – лидарная функция; $\alpha(r)$ – коэффициент аэрозольного ослабления сигнала в атмосфере.

Обозначим $S(r) + \varepsilon_S \equiv \tilde{S}(r)$. Уравнение (8) можно преобразовать к виду

$$\alpha(r) = \frac{\tilde{S}(r)}{Cb(r)} \left[1 - 2 \int_0^r \frac{\tilde{S}(r')}{cb(r')} dr' \right]^{-1}. \quad (9)$$

Если предположить, что структура функций C , $S(r)$, $b(r)$ известна, то в зависимости от целей исследования и наличия информации можно использовать обе формы уравнений либо совместно, либо по отдельности. Отметим, что при совместном использовании совокупность уравнений (8)–(9) составляет алгоритмическую основу лазерной томографии атмосферных аэрозолей.

Функции I_{1v} , I_{2v} , T_{bv} , $S(r)$ в (3) – (9) можно рассматривать как дополнительные компоненты функции состояния атмосферы Φ . Функции $B_v(T)$, $\tau(v, \xi)$, $\alpha(r)$, $\gamma_l(l)$ в моделях наблюдений зависят от функции состояния моделей процессов, которые и должны оцениваться с помощью решения обратных задач. Символом ε с соответствующими индексами мы, как и ранее, обозначаем ошибки моделей. Они подлежат оценке по результатам измерений. Их количественные значения характеризуют меру качества моделей на множестве данных наблюдений.

Функционалы для организации моделирования и усвоения данных наблюдений

1. Целевые функционалы для оценок обобщенных характеристик процессов и моделей, качества атмосферы и информативности наблюдений. Общий вид этих функционалов

$$\Phi_k(\Phi) = \int_{D_{IV}} (F_k(\Phi) \chi_k(\mathbf{x}, t)) dD dt, \quad k = \overline{1, K}, \quad \Phi \in Q(Dt), \quad (10)$$

где $F_k(\Phi)$ – функции заданного вида, ограниченные и дифференцируемые относительно Φ в $Q(Dt)$.

2 «Рабочие» функционалы для организации алгоритмов моделирования и усвоения данных.

2.1. Функционалы качества дистанционных наблюдений:

$$\Psi_{1\alpha}(\Phi) = \int_{D_t} (I_{v\alpha} - I_{v\alpha m})^T \chi_{1\alpha}(\mathbf{x}, t) (I_{v\alpha} - I_{v\alpha m}) dD dt,$$

$$\alpha = \overline{3, 6}, \quad (11)$$

где α – номер модели наблюдения, соответственно сделаны переобозначения измеряемых функций; $I_{v\alpha}$ – рассчитанные образы наблюдаемых величин с помощью моделей наблюдений (3) – (8); $I_{v\alpha m}$ – данные наблюдений; индекс T обозначает операцию транспонирования.

2.2. Функционалы качества для контактных наблюдений за функциями состояния моделей процессов (1), (2):

$$\Psi_{2i}(\Phi) = \int_{D_t} \{([\Phi]_m - \Phi_m)^T \chi_{3\Phi}(\mathbf{x}, t) ([\Phi]_m - \Phi_m)\}_i dD dt, \quad i = \overline{1, n\Phi}, \quad (12)$$

где индексом m отмечены данные наблюдений, а символом $[\]_m$ – операции сноса (интерполяции) функции состояния на множество точек $(\mathbf{x}, t) \in D_t^m \subset D_t$, где производятся наблюдения; $n\Phi$ – число функций состояния, учитываемых в моделях процессов (1), (2).

2.3. Функционалы качества моделей или меры ошибок моделей:

$$\Psi_{4i}(\Phi) = \int_{D_m} \{\varepsilon_j^T \chi_{4\Phi}(\mathbf{x}, t) \varepsilon_{\Phi}\}_i dD dt, \quad i = \overline{1, n\Phi m}, \quad (13)$$

где $n\Phi m$ – общее число моделей процессов плюс моделей наблюдений, участвующих в работе.

2.4. «Регуляризирующие» функционалы для учета априорной информации об оцениваемых функциях и параметрах:

$$\Psi_{5i}(\Phi) = \int_{D_t} (\Phi_i - \Phi_{ia})^T \chi_{5\Phi}(\mathbf{x}, t) (\Phi_i - \Phi_{ia}) dD dt, \quad (14)$$

$$\Psi_{6i}(\Phi) = \int_{D_t} |\text{grad } \Phi_i^{(0)}|^2 \chi_{6\Phi}(\mathbf{x}, t) dD dt, \quad i = \overline{1, n\Phi}, \quad (15)$$

$$\Psi_{7i}(\Phi) = \int_{D_t} [(\mathbf{Y} - \mathbf{Y}_a)^T \chi_{3\Phi}(\mathbf{x}, t) (\mathbf{Y} - \mathbf{Y}_a)] dD dt. \quad (16)$$

Здесь нижним индексом a отмечены априорные оценки, а верхним индексом (0) – начальные значения соответствующих объектов. Функционалы этого типа вводятся для уменьшения числа степеней свободы в обратных задачах и для регуляризации процесса вычислений. При решении обратных задач в функционале (16) учитываются только те компоненты вектора параметров, которые необходимо уточнить. При оценке чувствительности целевых функционалов (10) в вариационном принципе участвуют все параметры моделей и источников, которые могут варьироваться.

Для удобства построения алгоритмических конструкций все функционалы определяются по одному принципу, т.е. записываются в виде интегралов с квадратичными подынтегральными выражениями типа невязок из пространства функций состояния и неотрицательными весовыми функциями из соответствующих сопряженных пространств. Эти функции обозначены через $\chi(\mathbf{x}, t)$, $\chi(v, \mathbf{x}, t)$, нижние индексы отмечают их информационную принадлежность к соответствующим объектам. Выражения $\chi(\mathbf{x}, t) dD dt$, $\chi(v, \mathbf{x}, t) dD dt dv$ обозначают меры Радона [8] в областях D_t , D_{IV} соответственно. В общем случае это векторные весовые функции и функции меры. Их структура согласована со структурой скалярных произведений в функционалах (10)–(16).

Теперь, следуя [6], для организации методов прямого и обратного моделирования определим основной функционал

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_k^h(\Phi) = & \{ \Phi_k(\Phi) + \sum_{q=1}^2 \int_{D_t} (L_q(\Phi) \cdot \Phi^*)_q dD dt + \\ & + \sum_{q=3}^6 \int (L_q(\Phi) \cdot \Phi^*)_q dv dD dt + \sum_{\langle \alpha \rangle} \omega_\alpha \Psi_\alpha(\Phi) \}^h, \\ \omega_\alpha \geq 0, \sum_{\langle \alpha \rangle} \omega_\alpha = 1, k = 1, \dots, K. \end{aligned} \quad (17)$$

В этом выражении первое слагаемое представляет собой целевой функционал из (10), второе учитывает модели процессов (1), (2), третье – модели измерений (3)–(9), а в четвертом собраны все функционалы (11)–(16). Индекс α «пробегают» упорядоченное множество этих функционалов, переименованных подряд; ω_α – весовые коэффициенты. Скалярные произведения во втором и третьем слагаемых выбираем так, чтобы при $\Phi^* = \Phi$ они давали соотношения баланса энергии. Верхний индекс h обозначает дискретизацию по пространству, времени и частоте в D_r, D_N .

Дискретизацию осуществляем с использованием методов слабой аппроксимации, расщепления и декомпозиции. Все кубатурные формулы для интегралов согласуются на одних и тех же сетках. Окончательно дискретные аппроксимации моделей и алгоритмы получаются из условий

стационарности функционалов $\tilde{\Phi}_k^h(\Phi)$ [6]:

1) для основных задач и методов прямого моделирования – из условий стационарности к вариациям компонентов сопряженной функции Φ^* ;

2) для сопряженных задач и методов обратного моделирования – из условий стационарности к вариациям компонентов функции состояния Φ ;

3) если в моделях учитываются ошибки, то условия стационарности к вариациям компонентов функции ошибок дают систему уравнений для расчета этих ошибок по фактической информации, заложенной в функционалах (11)–(16) через соответствующие функции чувствительности.

В сопряженных задачах градиенты функционалов (11), (12), (14) относительно компонентов функции состояния Φ в узлах сеточной области выступают в качестве функций источников для процедур усвоения данных дистанционных и контактных наблюдений.

При этих условиях оценки вариаций целевых функционалов получаются оптимальными в том смысле, что они имеют точность второго порядка малости относительно вариаций Φ^* , Φ , ε . Связь между вариациями $\delta\tilde{\Phi}_k^h(\Phi)$ и вариациями параметров моделей реализуется посредством функции чувствительности. Алгоритмы для расчета этих функций описаны в [6, 9]. Их выражения определяются коэффициентами при вариациях соответствующих параметров в основном соотношении чувствительности для $\delta\tilde{\Phi}_k^h(\Phi)$, записанном с учетом указанных выше трех условий стационарности [10].

Наиболее эффективные алгоритмы для решения обратных задач получаются в том случае, когда направление зондирования в моделях наблюдений совпадает с координатными линиями в дискретных аналогах моделей процессов. Это удобно, например, в задачах вертикального зондирования атмосферы.

Учет ошибок в моделях и введение функционалов меры этих ошибок (13) в функционал (17) расширяют возможности совместного использования моделей и данных

наблюдений. В частности, такой подход позволяет с единых позиций в рамках одного и того же вариационного принципа строить как процедуры усвоения данных с использованием сопряженных задач, так и процедуры типа калмановской фильтрации [6]. Но, пожалуй, что важнее всего, так это возможность построения конструктивного алгоритма диагностики качества моделей по фактической информации. Этот алгоритм является следствием третьего условия из отмеченных выше условий стационарности функционала (17).

Вопросы реализации описанной схемы вычислений в разных аспектах обсуждаются в работах [6, 7, 9–11], поэтому дополнительно отметим только некоторые способы повышения эффективности алгоритмов за счет распараллеливания. Функционал (17) построен так, что все модели и все функционалы в нем участвуют на принципах аддитивности. Выбранный нами способ дискретизации с помощью вариационного принципа и метода расщепления обеспечивает конструирование численных моделей для основных и сопряженных задач в виде схем расщепления, взаимно согласованных на всех этапах вычисления через функционал (17). Как следствие этого, возможна многоуровневая схема распараллеливания алгоритмов: а) по совокупности целевых функционалов (10); б) по внутренней структуре расширенного функционала (17).

На верхнем системном уровне оценки всех целевых функционалов могут осуществляться параллельно. Следующий уровень – работа с расширенными функционалами (17) для каждого целевого функционала. Каждый этап технологии моделирования, индуцированный отдельными элементами этого функционала, а именно решение прямых и сопряженных задач для каждой модели, расчет функций чувствительности и т.д., может реализоваться параллельно. Окончательно, на нижнем системном уровне, поперечное расщепление по пространственным переменным также может быть выстроено в параллельную структуру.

Таким образом, задача восстановления характеристик состояния атмосферы по данным дистанционных и контактных наблюдений сформулирована как оптимизационная задача совместного использования моделей и данных наблюдений для восстановления пространственно-временной структуры полей и диагностики качества моделей. Вариационный принцип для расширенного функционала (17) дает замкнутую систему алгоритмов прямого и обратного моделирования для решения этой задачи.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (гранты № 98-05-65318, 99-07-90422), ИГ СО РАН-97 № 30, программы «Сибирь» и Программы перспективных информационных технологий Миннауки России (грант № 0201.06.269/349).

1. Малкевич М.С. Оптические исследования атмосферы со спутников. М.: Наука, 1973. 303 с.
2. Кондратьев К.Я., Тимофеев Ю.М. Метеорологическое зондирование атмосферы из космоса. Л.: Гидрометеиздат, 1978. 278 с.
3. Зуев В.Е., Кауль Б.В., Самохвалов И.В. и др. Лазерное зондирование промышленных аэрозолей. Новосибирск: Наука, 1986. 186 с.
4. Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992. 335 с.
5. Наумов А.П., Ошарина Н.Н. Восстановление высотных распределений влажности из измерений нисходящего атмосферного радиоизлучения в микроволновых окнах прозрачности // Изв. АН. Сер. ФАО. 1999. Т. 35. № 6. С. 762–772.
6. Penenko V.V. // Bull NCC. Num. Model. in Atmosph., etc. 1994. V. 4. P. 32–51.

7. Пененко В.В., Цветова Е.А. // ПМТФ. 1999. Т. 40. № 2. С. 137–147.
8. Шварц Л. Анализ. М.: Мир, 1982. Т. 1. 824 с.
9. Penenko V.V., Tsvetova E.A. // Bull. NCC. Num. Model. in Atmosph., etc. 1995. V. 2. P. 53–74.
10. Пененко В.В. // Оптика атмосферы и океана. 1999. Т. 12. № 5. С. 458–462.
11. Пененко В.В., Цветова Е.А. Об оценке информативности наблюдательных экспериментов // Оптика атмосферы и океана. 2000. Т. 13. № 6. (В печати).

V.V. Penenko. Inverse problems for multicomponent monitoring and data assimilation.

An aspect of the methodology is considered that is related to the inverse problem of reconstruction of the temperature and component composition of the atmosphere using remote sensing and contact data. Observation model, the model of optical sensing of solar radiation transport as well as the model of transport and transformation of substances in the atmosphere are included in necessary tool kit on which the methodology is based. Conceptual aspects of the inverse problem statements, system organization of numerical algorithms and the ways of their realization are discussed.