

Нанодиагностика природной и техногенной среды и супервычисления

Т.А. Сушкевич, С.А. Стрелков, С.В. Максакова, В.В. Козодеров, Фомин Б.А.

*Учреждение Российской академии наук
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,
125047 Москва, Миусская пл., 4
E-mail: tamaras@keldysh.ru;*

При дистанционном зондировании и мониторинге технических объектов и окружающей среды носителем информации об их состоянии и свойствах является электромагнитное излучение в диапазоне спектра от ультрафиолета до миллиметровых волн, регистрируемое различными средствами. Представляют актуальность перспективные гиперспектральные системы нанодиагностики природной и техногенной среды на основе данных аэрокосмического дистанционного зондирования атмосферы и поверхности планеты (объектов техносферы на поверхности). Для решения таких проблем разрабатывается информационно-математическое обеспечение для супервычислений на суперкомпьютерах, включающее прямые и обратные задачи теории переноса излучения, модели которых основаны на передаточном операторе [1, 2].

Ключевые слова: перенос излучения, природные и техногенные среды, нанодиагностика, гиперспектральный подход, аэрокосмическое дистанционное зондирование, математическое моделирование, передаточный оператор, супервычисления.

Введение

При дистанционном зондировании и мониторинге технических объектов и окружающей среды носителем информации об их состоянии является электромагнитное излучение, регистрируемое различными средствами. Представляют актуальность перспективные гиперспектральные системы нанодиагностики природной и техногенной среды на основе данных аэрокосмического дистанционного зондирования атмосферы и земной поверхности (окружающей среды и объектов техносферы). Для решения таких проблем требуется информационно-математическое обеспечение, включающее прямые и обратные задачи теории переноса излучения. Даже на современных высокопроизводительных вычислительных системах стоят проблемы скорости вычислений и оптимальной организации параллельных расчетов при больших размерностях разностной сетки, а также передачи больших массивов результатов расчета по сетям от суперкомпьютера к рабочей станции оператора для последующей обработки.

Три типа радиационных проблем требуют учета эффектов, связанных с поверхностью Земли. *Первый тип* – это проблемы энергетики, радиационного баланса Земли и радиационных блоков для моделей климата и прогноза погоды, когда Солнце играет роль источника излучения. Такие задачи обычно решаются для полной системы атмосфера-Земля без разделения вкладов атмосферной радиации и излучения земной поверхности. *Второй тип* – это задачи дистанционного зондирования атмосферы и облачности, когда подстилающая поверхность рассматривается как помеха и необходимо выделить вклад излучения земной поверхности. *Третий тип* – это задачи дистанционного зондирования поверхности, когда необходимо выделить атмосферный фон (провести атмосферную коррекцию) или по крайней мере принять этот эффект влияния атмосферы во внимание. Обзор методов учета земной поверхности в задачах дистанционного зондирования и расче-

тах радиационного поля Земли, содержащий около 800 источников публикаций, представлен в [3] Ничего принципиально или концептуально нового в теоретическом плане за последнее десятилетие не появилось. Расширилась сфера приложений. Некоторые космические системы дистанционного зондирования земной поверхности (например, специализирующиеся по пожарам мини-спутники) стали работать в штатном расписании. Мало внимания уделяется проблемам повышения точности модельных расчетов. Распространяются и повсеместно используются несколько компьютерных кодов, в которых заложены упрощенные модели переноса излучения. Такой подход оправдан для экспресс-анализа и оперативной массовой обработки данных.

Как показал анализ состояния проблемы учета и дистанционного зондирования земной поверхности, все многообразие существующих известных подходов сводится к четырем основным. *Первым* появился неявный способ учета отражающей поверхности, когда вклад подстилающей поверхности и атмосферы не разделяются. *Второй* способ – это когда начиная с 50-ых годов 20-го века появились работы по выделению вклада горизонтально-однородной ламбертовой поверхности для однородного плоского слоя на основе альбедного подхода. Этот явный способ, когда в аналитическом виде выделяется зависимость от альбедо поверхности, самый распространенный при решении задач дистанционного зондирования, расчете радиационных полей Земли и входит во все известные климатические модели. Альбедный подход у нас впервые стал разрабатывать В.В. Соболев, имя которого носит известная формула. Этот подход К.Я. Кондратьев и О.И. Смоктий [4], а также В.В. Козодеров [5, 6] использовали для определения передаточной функции. Т.А. Сушкевич методом функций влияния обобщила этот подход на разные геометрии и вертикально неоднородные плоские и сферические системы переноса как частный случай оптического передаточного оператора [1, 2, 7].

Третий подход — это метод функционалов и сопряженных уравнений, математический аппарат которых разрабатывали Г.И. Марчук и Г.А. Михайлов преимущественно для применения Метода Монте-Карло [8-10].

Четвертый — это явный способ учета вклада подстилающей поверхности с помощью оптического передаточного оператора, построенного методом функций влияния (ФВ) и пространственно-частотных характеристик (ПЧХ) Т.А. Сушкевич [1, 2, 11-15]. Частный случай был разработан В.Г. Золотухиным и Д.А. Усиковым [16]. Все многообразие подстилающих поверхностей (без учета возвышений и орографии) и граничных источников можно объединить в *четыре основных типа*: горизонтально-однородные изотропные; горизонтально-однородные анизотропные (например, растительность, океан); горизонтально-неоднородные изотропные; горизонтально-неоднородные анизотропные (мозаичные). Термин ФВ объединяет все типы сингулярности и диффузности источника и все типы поверхностей. Термин ПЧХ — это двумерные фурье-спектры в горизонтальной плоскости, в том числе от ФВ.

Постановка задачи

В этой статье нас интересует задача аэрокосмического дистанционного зондирования поверхности (окружающей среды и объектов техносферы) при гиперспектральных наблюдениях не только в надир, но и по наклонным трассам. Это *третий тип задачи*, ко-

$$K\Theta_m^\uparrow = 0, \quad \Theta_m^\uparrow \Big|_{d\downarrow, m} = 0, \quad \Theta_m^\uparrow \Big|_{d\uparrow, m+1} = f_{\delta, m}^\uparrow; \quad f_{\delta, m}^\uparrow = \delta(s - s_m^\uparrow).$$

Вводится матричный оператор, описывающий взаимодействие между подслоями через функции влияния (P - матрица, содержащая операторы R_m^\downarrow , R_m^\uparrow и T_m^\downarrow , T_m^\uparrow):

$$GF = P(\Theta, F) = \begin{pmatrix} 0 \\ R_2^\uparrow(\Theta_1^\downarrow, F_1^\downarrow) + R_2^\uparrow(\Theta_1^\uparrow, F_1^\uparrow) + T_2^\uparrow(\Theta_2^\downarrow, F_2^\downarrow) \\ \dots \\ T_m^\downarrow(\Theta_{m-1}^\downarrow, F_{m-1}^\downarrow) + T_m^\downarrow(\Theta_{m-1}^\uparrow, F_{m-1}^\uparrow) + R_m^\downarrow(\Theta_m^\downarrow, F_m^\downarrow) + R_m^\downarrow(\Theta_m^\uparrow, F_m^\uparrow) \\ R_{m+1}^\uparrow(\Theta_m^\downarrow, F_m^\downarrow) + R_{m+1}^\uparrow(\Theta_m^\uparrow, F_m^\uparrow) + T_{m+1}^\uparrow(\Theta_{m+1}^\downarrow, F_{m+1}^\downarrow) + T_{m+1}^\uparrow(\Theta_{m+1}^\uparrow, F_{m+1}^\uparrow) \\ \dots \\ T_M^\downarrow(\Theta_{M-1}^\downarrow, F_{M-1}^\downarrow) + T_M^\downarrow(\Theta_{M-1}^\uparrow, F_{M-1}^\uparrow) + R_M^\downarrow(\Theta_M^\downarrow, F_M^\downarrow) + R_M^\downarrow(\Theta_M^\uparrow, F_M^\uparrow) \\ R_b^\uparrow(\Theta_M^\downarrow, F_M^\downarrow) + R_b^\uparrow(\Theta_M^\uparrow, F_M^\uparrow) \end{pmatrix}.$$

Асимптотически точное решение задачи (4) получается в форме линейного векторного функционала, ядром которого является вектор функций влияния Θ :

$$\Phi_q = (\Theta, Z); \quad Z \equiv \sum_{n=0}^{\infty} G^n E.$$

Этот функционал есть оптический передаточный оператор гетерогенной системы переноса излучения, в котором все эффекты многократного рассеяния и поглощения в атмосфере с учетом взаимодействия между подслоями, а также отражения от подстилающей поверхности содержатся в векторе «сценариев» на всех границах Z . Оптическое изображение «сценария» или яркость подстилающей поверхности удовлетворяет уравнению Фредгольма второго рода

$$Y = R_b(\Theta, Y) + E_b,$$

которое называют «приземной фотографией». Полное излучение САП и «космическая фотография» (изображение, получаемое при наблюдении из космоса) есть «суперпозиция»

$$\Phi = \Phi_a + (\Theta, Y).$$

О супервычислениях и параллельных алгоритмах

Цель разработки обеспечить максимально возможную переносимость «унаследованного» комплекса программ [17], который развивается по мере появления новых суперкомпьютеров со своими архитектурами, и обеспечить прозрачную работу в распределенной сетевой среде. Комплекс должен без значительных переделок работать на кластере рабочих станций (workstation clusters) и/или массиве параллельных процессоров (massively parallel processor (ММР) и др.). Параллелизм реализуется в системе массовых расчетов большого набора краевых задач теории переноса излучения в широком диапазоне спектра длин волн с высоким разрешением для наборов «оптической погоды», состояний подстилающей поверхности, источников излучения.

Используются следующие *приемы распараллеливания вычислений*:

1) распределенные вычисления по физическим моделям:

- многоспектральные, в том числе гиперспектральные (по длине волны);
- по оптико-геофизической погоде (по коэффициентам общей краевой задачи);
- по источникам излучения;

2) распределенные вычисления на основе методического распараллеливания - декомпозиции краевых задач:

- по моделям переноса излучения, т.е. по приближениям теории переноса излучения;
- по подобластям;
- по параметрам функций влияния;
- по компонентам векторов функций влияния;
- по параметрам пространственно-частотных характеристик;
- по компонентам векторов пространственно-частотных характеристик;
- по компонентам векторных функционалов;

3) алгоритмическое распараллеливание для многомерных моделей:

- однократное рассеяние по характеристикам;
- многократное рассеяние по интегралам столкновений;
- по квадрантам угловых разностных сеток;
- по подобластям с разными сеточно-характеристическими схемами.

Основные составные части математического обеспечения:

- банки данных по оптико-метеорологическим моделям атмосферы и земной поверхности;

- система автоматизированного расчета спектро-энергетических и других радиационных характеристик атмосферы и Земли в различных диапазонах спектра от УФ до ММВ;

- банки данных радиационных характеристик (функции влияния локальных возмущений параметров или источников в атмосфере, дымах, облаках, гидрометеорах, океане и на земной поверхности, пространственно-угловые и спектральные распределения яркости системы Земля-атмосфера, функции пропускания и сферическое альbedo атмосферы и т.д.);

- пакеты программ обработки, визуализации и диагностики результатов численного эксперимента и аэрокосмических данных.

Библиотека программ численного решения краевых задач теории переноса излучения в рассеивающих, поглощающих и излучающих средах (атмосфера, океан, облачность, дымы, гидрометеоры, водные бассейны) состоит из набора программ на Fortran, каждая из которых позволяет рассчитывать радиационные характеристики при заданных модели и методике (краевая задача теории переноса, геометрия, численный метод и т.д.) в определенном диапазоне длин волн.

С учетом источников и процессов трансформации излучения выделяются *четыре основные физико-математические модели*, отвечающие спектральным диапазонам:

- оптический диапазон (источник – Солнце, многократное рассеяние);
- ближний ИК-диапазон (источники – Солнце и собственное излучение, многократное рассеяние);
- ИК-диапазон (источник – собственное излучение, без многократного рассеяния, сложная структура спектров поглощения);
- ММВ диапазон (источник – собственное радиоизлучение, многократное рассеяние в гидрометеорах и облаках, сложные спектры поглощения).

Программные комплексы создаваемой системы автоматизированного расчета, обработки и анализа радиационных характеристик Земли и решения задач дистанционного зондирования разрабатываются на многопроцессорных суперЭВМ с параллельными вычислениями под управлением через сеть с «рабочего места», организованного на РС.

Создаваемая система содержит *три группы программных комплексов*.

Первая группа программ – формирование оптико-метеорологических моделей среды: программы работы с архивом и базами данных моделей атмосферы, облаков, дымов, земной поверхности, океана; банк спектров поглощения атмосферных газов; банк характеристик аэрозольного рассеяния и поглощения; формирование модели атмосферы; пакеты данных к программам расчета радиационных характеристик и т.д.

Вторая группа программ – численное решение скалярного уравнения переноса излучения быстрыми приближенными и репрезентативными высокоточными методами для плоской геометрии: для системы свободная атмосфера-дымовая завеса, для системы атмосфера-океан, для системы атмосфера с многоярусными облаками, для функции влияния атмосферы, дымов, облачности, гидрометеоров, океана, для функции пропускания атмосферы, отягощенной многократным рассеянием, и т.д.

Третья группа программ – обработка и диагностика результатов расчетов: аналитическая аппроксимация и параметризация табличных функций; компьютерная графика и визуализация; решение обратных задач по восстановлению параметров среды и т.д.

Предложенная архитектура программного обеспечения с функциональным наполнением, ориентированным на решение задач мониторинга развития и оценки последствий воздействия техногенных аварий и природных катастроф, а также природно-ресурсных, экологических, геоэкоинформационных и т.п. задач, позволяет осуществлять модификацию и адаптацию вычислительно-информационной системы применительно к конкретным проблемам математического моделирования радиационных процессов в системе Земля-атмосфера или восстановления набора параметров зондируемой среды.

В настоящее время, в отличие от момента начала работ в 60-е годы, благодаря активному развитию теоретических и экспериментальных исследований по проблемам светорассеяния, а также систем космических наблюдений мы располагаем достаточно достоверными данными

- о тонкой структуре полос поглощения водяного пара и газовых компонент атмосферы и способах учета этих данных для математического моделирования радиационного переноса в поглощающей реальной атмосфере;

- о коэффициентах и индикатрисах рассеяния атмосферы с учетом аэрозольных примесей;

- об отражающих свойствах естественных поверхностей;

- о географических, сезонных, суточных распределениях, вариациях и статистических характеристиках влажности, давления, температуры, концентраций газовых и аэрозольных компонент и облачности, имеющих случайный характер и играющих основную роль в изменчивости радиационного поля Земли.

Каждая из этих моделей описывается совокупностью оптико-метеорологических (геофизических) характеристик атмосферы, облаков, подстилающей поверхности, которые являются входными физическими данными для уравнения переноса (через коэффициенты, граничные условия, источники). Степень близости расчетных полей яркости САП к реальным определяется, с одной стороны, адекватностью входных параметров фактическим,

с другой стороны, – математической идеализацией процесса переноса излучения, реализованной в модели, методе, расчетном алгоритме.

Результаты единичных расчетов накапливаются в архивах решений, которые переформируются в управляемые базы данных и используются в дальнейшем для расчета различных функционалов и для визуальной и графической обработки в интересах конкретных целевых приложений. Программы (вычислительные модули) для расчета «единичного» варианта реализованы на языке Fortran. Существенно, что в процессе счета варианта и при записи в архив решений используются операторы прямого доступа Fortran.

Реализация функции управления и сетевого взаимодействия «унаследованным» комплексом программ производится с помощью оболочек (wrapper's), написанных на языке описания сценариев Perl. Другими словами, производится упаковка Fortran-программ внутрь модулей на языке Perl (Perl scripts).

Заключение

Цель работы – на основе теоретико-расчетных исследований обосновать возможности новых перспективных гиперспектральных методик аэрокосмического и наземного дистанционного зондирования системы атмосфера-Земля по спектрам солнечного и собственного излучения в интересах нанодиагностики объектов окружающей среды и техносферы. Первые гиперспектрометры были использованы в 1981-1983 гг. «Спектр-256» испытывался на ДОС «Салют-7». В 80-ые годы такие работы проводились активно... В последние годы наметился всплеск интереса к подобным работам, поскольку появились новые возможности в связи с развитием нанотехнологий, новой элементной базой и усовершенствованными ПЗС-матрицами.

Научная идея основана на использовании существенных различий в спектральном ходе поглощения, рассеяния, излучения и пропускания основных компонент системы атмосфера-Земля и спектральных характеристик отражения объектами природно-техногенной сферы для выделения интервалов длин волн спектра многократно рассеянного солнечного и собственного излучения, информативных в отношении конкретных компонент, и на этой основе дискриминировать компоненты по их спектральным характеристикам.

Новые перспективные возможности математического моделирования атмосферной радиации Земли связаны с разработкой информационно-математической системы для широкой области приложений на суперкомпьютерах и кластерах с распараллеливанием вычислений и распределением ресурсов. В России, США, Японии, Китае, Индии, Германии, Испании, Англии, Франции, Бразилии и др. странах появились высокопроизводительные с мощными ресурсами памяти суперкомпьютеры нового поколения, ориентированные на массовый параллелизм и массовые супервычисления. Это позволяет ставить более сложные многомерные задачи, которые ближе и адекватнее натурным условиям.

Работа выполняется при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 09-01-00071, 08-01-00024).

Литература

1. Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Иолтуховский А.А. Метод характеристик в задачах атмосферной оптики // М.: Наука, 1990. 296 с.
2. Сушкевич Т.А. Математические модели переноса излучения // М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. 661 с.
3. Сушкевич Т.А., Максакова С.В. Обзор методов учета земной поверхности в задачах дистанционного зондирования и расчетах радиационного поля Земли // Препринт № 61-63. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 1999. 126 с.
4. Кондратьев К.Я., Смоктий О.И. Об определении передаточной функции атмосферы при спектрофотометрировании поверхности планеты из космоса // Докл. АН СССР. 1972. Т. 206. № 5. С. 1102–1105.
5. Козодеров В.В. Атмосферная коррекция видеоизображений // Исслед. Земли из космоса. 1983. № 2. С. 65–75.
6. Космическое землеведение: информационно-математические основы // Под ред. В.А. Садовниченко. Авторы: Козодеров В.В., Косолапов В.С., Садовнический В.А., Тимошин О.А., Тищенко А.П., Ушакова Л.А., Ушаков С.А. М.: Изд-во МГУ, 1998. 571 с.
7. Сушкевич Т.А., Иолтуховский А.А. Численное решение уравнения переноса с аналитическим учетом альбедо // Препринт № 87. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР 1983. 28 с.
8. Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А. Решение прямых и некоторых обратных задач атмосферной оптики методом Монте-Карло. Новосибирск: Наука, 1968. 100 с.
9. Марчук Г.И. Уравнение для ценности информации с метеорологических спутников и постановка обратных задач // Космич. исслед. 1964. Т. 2. Вып. 3. С. 462-477.
10. Марчук Г.И. Сопряженные уравнения и анализ сложных систем // М.: Наука, 1992. 336 с.
11. Сушкевич Т.А., Иолтуховский А.А., Стрелков С.А. О влиянии атмосферы при дистанционном зондировании подстилающей поверхности (векторная задача) // Исследование природных ресурсов Земли из космоса. Труды VII научных чтений по космонавтике. М.: ИИЕТ АН СССР, 1983. С. 10–44.
12. Численное решение задач атмосферной оптики // Под ред. М.В. Масленникова и Т.А. Сушкевич. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1984. 234 с.
13. Сушкевич Т.А. О решении задач атмосферной коррекции спутниковой информации // Исслед. Земли из космоса. 1999. № 5. С. 71–92.
14. Сушкевич Т.А. Линейно-системный подход и теория оптического передаточного оператора // Оптика атмосферы и океана. 2000. Т. 13. № 8. С. 744-753.
15. Сушкевич Т.А. О задаче дистанционного зондирования поверхности через атмосферу планеты // Астрон. вестник. 2001. Т. 35. № 1. С. 51-62.
16. Золотухин В.Г., Усиков Д.А., Грушин В.А. Учет рассеяния света в атмосфере при обработке космических снимков земной поверхности // Исслед. Земли из космоса. 1980. № 3. С. 58–68.
17. Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Владимирова Е.В., Игнатьева Е.И., Куликов А.К., Максакова С.В., Соловьев М.В., Маньковский В.И. Теоретические основы и расчетные модели для построения мониторинга возникновения и развития аварий и катастроф // Безопасность России. Т. 6. Раздел первый. М.: МГФ "Знание", 1998. С. 419-430.

Nanodiagnostics of natural and anthropogenic media and supercomputing

T.A. Sushkevich, S.A. Strelkov, S.V. Maksakova, V.V. Kozoderov, B.A. fomin

Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS

125047 Moscow, 4 Miusskaya sg.

E-mail: tamaras@keldysh.ru

A new scientific direction is elaborated connected with modeling "scenarios" of development of anthropogenic accidents and natural disasters for perspective projecting of the updated operative space-borne systems and high spectral and spatial resolution remote sensing. The Centers of USA (NASA), Japan, India, China, Germany, European Space Agency and Japan create the powerful high-productive multiprocessor computer systems, which need new mathematical software to solve direct and inverse problems of radiation transfer theory, for the interests of international cooperation on airspace global monitoring of the Earth as well as on an international global project concerning studying of the evolution of the Earth, climate and natural phenomena using data bases of space-borne information.

Original universal mathematical tools are developed by the authors for radiation transfer modeling taking into account multiple scattering and absorption in multi-layer in-homogenous heterogeneous natural and artificial systems with different radiation regimes in separate areas of the system. The atmospheric channel considered as an element of the optical system of radiation transfer and as the optical transfer operator that is laid down on the basis of remote sensing system theory is formulated using a mathematical tool of the generalized solutions theory, parametric series of the regular perturbations theory, non-linear functionals, linear systems approach and superposition integral. The approach is based on construction of generalized solutions of general boundary-value problems for the radiation transfer equation in the form of linear vector functionals, which kernels are vectors of the influence functions of separate layers of the system. This approach is related to the class of techniques which are called "domain decomposition" with parallel calculations on sub-areas of the system.

Space monitoring of characteristics of outgoing radiation and the Earth radiation budget is an important element of global tracking the current state of the climate system and biosphere as well as a basic information resource for nanodiagnostics and forecast of the systems change and of the catastrophic phenomena.

Keywords: radiation transfer, mathematical modeling, transfer operator, aero-space remote sensing, nanodiagnostics, natural and anthropogenic media, supercomputing