

Теория переноса излучения и суперкомпьютинг: сопряженные задачи экологии, климата, мониторинга и дистанционного зондирования Земли, гиперспектральный подход и нанодиагностика природных сред (посвящается 65-летию ИПМ им. М.В. Келдыша РАН)*

Т.А. Сушкевич¹, С.А. Стрелков¹, С.В. Максакова¹, В.В. Белов², А.В. Зимовая²,
В.В. Козодеров³, С.М. Пригарин⁴, В.А. Фалалеева⁵, Л.Д. Краснокутская⁵, Б.А. Фомин⁶,
Г.Э. Колокутин⁶, А.С. Кузьмичев⁷, А.А. Николенко⁷, П.В. Страхов⁷, Б.М. Шурыгин⁷

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН¹, Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН², МГУ имени М.В. Ломоносова³, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН⁴, Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН⁵, Центральная аэрологическая обсерватория⁶, Московский физико-технический институт⁷

Впервые предлагается идея рассмотрения сложнейших проблем эволюции, климата, экологии, глобального мониторинга и дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) с гиперспектральными подходами и нанодиагностики природной среды и объектов как сопряженные. Радиационное поле Земли - единое физическое поле (электромагнитное излучение) и объединяющий фактор. Например, извержение вулканов и трансграничный перенос загрязнений, которые влияют на экологию и состояние окружающей среды, могут быть обнаружены методами ДЗЗ, а далее через перенос лучистой энергии, зависящей от загрязнителей природных сред, может влиять на климат и в конечном итоге на тренд эволюции Земли как планеты. Непреодолимая сложность проблемы состоит в том, что для исследований планеты не допустимы натуральные эксперименты и возможны только мониторинг и наблюдения разными средствами, с одной стороны, а с другой стороны на момент измерений радиации невозможно восстановить весь набор оптико-геофизических и оптико-метеорологических параметров системы "атмосфера-суша-океан", от которых зависит радиация, и не возможно повторить условия наблюдений, так как среда непрерывно изменяется и никогда не повторяется. И только математическое моделирование больших прямых и обратных задач теории переноса излучения с параллельным суперкомпьютингом позволяет провести теоретико-расчетные исследования столь сложных проблем и получить качественные и количественные оценки для анализа и прогнозов, а также для разных тематических приложений.

Ключевые слова: перенос излучения, природные среды, сопряженные прямые и обратные задачи, радиационное поле Земли, радиационный форсинг, математическое моделирование, мониторинг, гиперспектральное дистанционное зондирование, климат, экология, нанодиагностика, супервычисления

1. Введение

Посвящается 65-летию юбилею ПЕРВОГО в мире Института прикладной математики, который носит имя его создателя и первого директора Мстислава Всеволодовича Келдыша [1]. Институт создан в соответствии с распоряжением Совета Министров СССР от 18 апреля 1953 г. № 611-рс и распоряжением Президиума Академии наук СССР от 27 апреля 1953 г. № 0012002 как Отделение прикладной математики Математического института им. В.А. Стеклова Академии наук СССР (ОПМ МИАН СССР). В соответствии с постановлением Президиума Академии наук СССР от 8 июля 1966 г. № 465-010 ОПМ МИАН СССР преобразовано в

* Исследование поддерживается грантами Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 18-01-00609, 17-01-00220).

Институт прикладной математики Академии наук СССР. Ныне это Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» (Институт Келдыша). Подтверждается стратегический выбор ответа на вопрос "Зачем нужен космос?", сделанный Главным Теоретиком Космонавтики академиком М.В.Келдышем в 1955 г.: "разведка и наблюдение Земли", актуальный в XX и XXI веках.

В 1955 году в Институте Келдыша профессор МГУ им. М.В.Ломоносова ПЕРВЫЙ советский модельер-вычислитель задач теории переноса Е.С.Кузнецов (13.03.1901-17.02.1966) [2] создал уникальный и единственный в мире отдел "Кинетические уравнения", в котором проводились исследования всех типов уравнений и классов моделей кинетической теории в разных приложениях, в том числе в атомных, реакторных и термоядерных проектах, высоко- и низкотемпературной плазме, атмосферной оптике, оптике океана, климате, космических проектах, астрофизике и т.д. В США и Англии его конкурентом был С.Чандрасекар.

После подписания «Парижского соглашения по климату» в 2016 г. ВПЕРВЫЕ на уровне международных соглашений "климат" обошел по значимости "экологию", хотя они и взаимосвязаны. ВПЕРВЫЕ открыто начали говорить о двух важнейших механизмах: контроль за климатом, управление климатом. КОНТРОЛЬ за климатом - это прежде всего ДИСТАНЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ (ДЗЗ) "Климатической системы Земли" (КСЗ), т.е. международный глобальный мониторинг КСЗ, включающий: международную сеть наземных наблюдений; международную глобальную космическую группировку землеобзора; мощные центры хранения big data; "computer science" (информационные технологии приема, хранения, обработки данных и изображений); тематический анализ данных на основе решения прямых и обратных задач ДЗЗ. УПРАВЛЕНИЕ климатом - это выполнение странами обязательств, принятых в рамках "Парижского соглашения" по климату и "Повестки дня до 2030 года" для обеспечения устойчивого развития, а также прогнозирование изменений климата на основе "сценарного" подхода и моделей КСЗ.

Современная экология - сложнейшая, разветвлённая междисциплинарная наука, четкие границы которой не определяются строго, поскольку в последние десятилетия эта наука активно развивается и принимает новые очертания и содержание. Американский биолог и эколог Б.Коммонер сформулировал четыре основных закона современной экологии, отражающие суть субъектов и объектов исследования и динамические процессы происходящего с присущим им синергетическим характером: (1) Всё связано со всем. (2) Ничто не исчезает в никуда. (3) Природа знает лучше - закон имеет двойной смысл - одновременно призыв сблизиться с природой и призыв крайне осторожно обращаться с природными системами. (4) Ничто не даётся даром (в оригинале что-то вроде "Бесплатных обедов не бывает"). Второй и четвёртый законы по сути являются перефразировкой основного закона физики - сохранения вещества и энергии. Первый и третий законы - действительно основополагающие законы экологии, на которых должна строиться парадигма данной науки. Основным законом является первый, который может считаться основой экологической философии и системного научного исследования.

Солнечное излучение - один из неотъемлемых факторов жизнеобеспечения человека, животного и растительного мира на Земле, а также одна из определяющих компонент земной экосистемы и биосферы, для поведения которых характерно взаимодействие отдельных компонент с проявлением синергизма (обратных связей, которые иногда приводят к взаимоусилению различных процессов). Поле солнечного излучения влияет на механизмы изменчивости (динамические процессы: циркуляция, конвекция, турбулентный перенос; радиационные и фотохимические процессы) геофизического, метеорологического, климатического состояния Земли, которые обладают сложными нелинейными связями, затрудняющими предсказание возможных эффектов, оценку их величины и значимости.

В связи с ростом риска естественно-природных и техногенных аварий, проведения военных операций и возможных крупномасштабных террористических актов экологическая и технологическая безопасность переходят в разряд стратегических и важнейших социально-экономических факторов, а математические модели становятся эффективным инструментом повышения качества и оперативности экологического прогнозирования и выявления, в упреж-

дающем режиме, предпосылок экологических катастроф на основе компьютерного моделирования "сценариев" и дают значительный социально-экономический эффект за счет предупреждения и своевременного принятия мер по снижению их отрицательных последствий. Гигантский научно-технический прогресс и беспрецедентный рост влияния человека на природу в XX веке ещё в 70-е - 90-е годы привели ученых всего мира, занимающихся анализом нарастающих антропогенных и естественно-природных воздействий на окружающую среду, к выводу: всемирная система мониторинга и иерархия моделей - главные инструменты изучения и предсказуемости изменений природных процессов и разделения естественных и антропогенных воздействий на сложнейшую динамическую систему, какой является планета Земля. В теоретических и прикладных исследованиях внедрился термин "Глобальная система" (определение введено академиком Н.Н.Моисеевым): необходимы анализ и синтез знаний о развитии планетарной цивилизации. Особую значимость приобретает проблема адекватной оценки роли и веса моделируемых подсистем в долгосрочной эволюции всей "Глобальной системы", в том числе связанных с радиационным полем Земли, объединяющим климат и экологию. Построение радиационной модели Земли как планеты и среды обитания человечества оказывается чрезвычайно важным для решения сложных прикладных и технических проблем, связанных с развитием методов и средств космического земледелия, космических систем землеобзора и т.д.

Электромагнитное излучение, регистрируемое разными средствами, является основным источником информации о строении и физических свойствах планетных атмосфер, поверхностей, биосферы при дистанционном зондировании. Для пассивных систем наблюдений источниками излучения являются внешний солнечный поток коротковолнового диапазона спектра (ультрафиолетовый, видимый, ближний инфракрасный) и собственное излучение планеты длинноволнового диапазона спектра (инфракрасный, миллиметровый), когда применимо квазиоптическое приближение теории переноса излучения. В активных системах в качестве источника инсоляции могут использоваться лазерный или прожекторный луч.

Сложность космических исследований и реализации новых космических проектов обусловлена тем, что приходится иметь дело с "замкнутым кругом" (для его преодоления начало космической эры стимулировало работы по прямым и обратным задачам теории переноса излучения): (а) чтобы измерить характеристики радиационного поля, нужны предварительные оценочные расчеты этих характеристик на основе моделей теории переноса излучения с учетом многократного рассеяния и поглощения солнечного и собственного излучения, (б) чтобы смоделировать перенос излучения в КСЗ, нужны данные о пространственных и спектральных распределениях оптико-геофизических и оптико-метеорологических параметров природных сред, описывающих взаимодействие излучения с компонентами КСЗ. В зависимости от длины волны и особенностей взаимодействия с веществом весь спектр электромагнитных волн делится на основные диапазоны: радиоволны, микроволновое излучение, инфракрасное излучение, видимый свет, ультрафиолетовое излучение, рентгеновское излучение, жесткое гамма-излучение.

Электромагнитное излучение и частицы способны распространяться практически во всех средах и в соответствии с приложениями могут описываться разными математическими моделями: уравнения Максвелла, уравнение Гельмгольца, уравнение Ландау, уравнение Власова, уравнение Лиувилля, уравнение Шредингера, уравнение Фоккера-Планка, уравнение Чепмена-Колмогорова-Смолуховского, уравнение диффузии и квазидиффузии, уравнения Боголюбова, интегральное уравнение переноса, кинетическое уравнение Больцмана и их приближения.

Сложность задачи заключается в непрерывной динамической изменчивости и многопараметричности модели среды, большом разнообразии процессов трансформации энергии Солнца, вариантов визуирования и способов измерений. Приходится иметь дело с краевыми задачами для интегро-дифференциального кинетического уравнения, описывающего перенос излучения в рассеивающих, поглощающих, излучающих, преломляющих, поляризующих средах с 1D, 2D, 3D плоской или сферической геометрией [3-5]. Теория переноса позволяет изучать влияние различных факторов на прохождение излучения и получать связи конкретных параметров среды с характеристиками радиационного поля. Таким образом можно определить чувствительность спектральной яркости, угловой и пространственной структуры поля радиации, пространственного распределения плотности и потоков излучения при заданных условиях освещения и наблюдения к вариациям этих параметров. Учитывая масштабность, многопараметричность, многовариантность земных условий, а также размерность фазового объема задач (от 2 до 7 пе-

ременных) несомненно требуется широкое использование информационных технологий и суперкомпьютеров, освоение которых начали в 1989 году. Руководитель коллектива Т.А.Сушкевич – ПЕРВЫЙ специалист в СССР, которая создала ПЕРВУЮ БОЛЬШУЮ программу и построила ПЕРВЫЙ ГРАФИК на ПЕРВОЙ БОЛЬШОЙ ЭВМ «Весна» (1963-1964 гг.).

В России создан масштабный научный потенциал методов решения скалярных и векторных краевых задач для кинетических уравнений в приближении Больцмана с бинарными взаимодействиями фотонов с веществом среды: аналитических (быстрых методов типа диффузии, квазидиффузии, двухпоточное приближение, метод Соболева, метод средних потоков и т.п.) численных методов, в том числе сеточные конечно-разностные методы, метод сферических гармоник, метод сложения и удвоения слоев, метод характеристик с итерациями по кратности рассеяния и их модификации с ускоряющими процедурами, метод функций влияния, метод пространственно-частотных характеристик, передаточные операторы для линейных и нелинейных систем, матричные и тензорные методы, методы декомпозиции и факторизации, гибридные методы, алгоритмы метода Монте-Карло и статистического моделирования на основе скалярных и векторных интегральных уравнений [3-5].

Для космических проектов и космических наблюдений с первых шагов освоения космического пространства необходимо было разрабатывать методологию решения двух основных классов многомерных задач теории переноса излучения: прежде всего для сферической оболочки (сферическая Земля с атмосферой), а позже для 3D плоского слоя (атмосфера над земной поверхностью), с двумя типами источников: внешним параллельным потоком солнечного (коротковолнового) излучения, собственным (длинноволновым, инфракрасным) излучением

В настоящее время мировое научное сообщество располагает практически достаточными фундаментальными знаниями и научным потенциалом, чтобы, объединив совместные усилия, провести достоверные комплексные и системные исследования на основе "сценариев", реализуемых на суперкомпьютерах с привлечением данных длительных временных рядов космических наблюдений двойного назначения. Однако такого объединения ученых не происходит...

И сейчас, когда в России объявлены приоритеты "модернизации" и прорывные направления, среди которых "Информационно-телекоммуникационные системы", в том числе "супервычисления" и "грид-системы", а также "Экология", "Климат", "Дистанционное зондирование и мониторинг территории России", "Рациональное природопользование" (в частности, влияние на экологическую и климатическую систему последствий естественно-природных и техногенных катастроф), НЕОБХОДИМО консолидироваться и вновь занять ведущие позиции в компьютерном моделировании радиационных задач дистанционного зондирования Земли и других планет, радиационного баланса Земли, радиационного форсинга и радиационных блоков в моделях климата и прогноза (где до сих пор используются упрощенные плоские приближения для расчета переноса солнечного излучения!).

В настоящей работе речь идет об информационно-математическом аспекте изучаемой проблемы и перспективах использования супервычислений.

2. Постановка задачи

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 (окружающей среды и объектов техносферы). 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 [4, 5]. 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 или океана, когда необходимо выделить атмосферный фон (провести атмосферную коррекцию) или по крайней мере принять этот эффект влияния атмосферы во внимание.

Для количественных оценок значимости разных климатообразующих факторов, зависящих от солнечного и собственного излучения, ввели специальную характеристику КСЗ - *радиационное воздействие (форсинг)*. По экспертным оценкам последнего времени от 40% до 60% приходится на радиационный форсинг на эволюцию климата. Радиационный форсинг - это изменение притока радиации (солнечной коротковолновой и длинноволновой лучистой энергии) в глобальной КСЗ под влиянием радиационно-активных факторов: альбедо и отражающие характеристики земной поверхности; облачность; океаны и моря; снежный и ледовый покров; загрязнения и газовый состав атмосферы; загрязнения и аэрозольный состав атмосферы; солнечная постоянная (солнечный климат); спектральные характеристики рассеяния и поглощения компонент природной среды; изотропная и анизотропная (при осадках и низких температурах) среда; радиационно-конвективная фотохимия и фотолиз; оптико-метеорологическая "погода" (температура, давление, влажность); биофизические, биогеофизические и биогеохимические процессы, круговорот веществ в биосфере и экосистеме.

Теоретической основой оценки радиационного форсинга являются решения прямых и обратных задач теории переноса излучения с учетом поляризации и рефракции, аэрозольного и молекулярного рассеяния и поглощения солнечного и собственного излучения, анизотропии, пространственной неоднородности и стохастичности атмосферы, суши, океана, облачности, гидрометеоров, используя гиперспектральные подходы в диапазоне длин волн от ультрафиолета (УФ) до миллиметровых волн (ММВ), содержащем миллионы спектральных линий поглощения компонентами и загрязнениями атмосферы.

Приходится иметь дело с общими краевыми задачами для интегро-дифференциального кинетического уравнения, описывающего перенос излучения в рассеивающих, поглощающих, излучающих, преломляющих, поляризующих средах с 1D, 2D, 3D сферической или плоской геометрией по пространству и единичной сферой направлений распространения излучения в каждой точке пространства. Используется линеаризованное уравнение Больцмана в приближении бинарных столкновений, основанном на дуализме "волна-частица". Теория переноса позволяет изучать влияние различных факторов на прохождение излучения в КСЗ и получать связи конкретных параметров среды с характеристиками радиационного поля. В рамках развития вычислительных средств рассматриваются следующие модели переноса излучения.

I. Спектральная, пространственная и угловая структуры поля яркости – интенсивности светового поля (солнечного излучения) при известных условиях освещения рассчитываются как решения общей краевой задачи для уравнения переноса.

II. Спектральные и пространственные структуры интегральных характеристик поля излучения рассчитываются как решения задач, отвечающих (математически) точным или разной степени приближенности линейным и нелинейным моделям, которые получаются из интегро-дифференциального уравнения переноса с помощью аппарата разложений решения по сферическим функциям, при контролируемых условиях и ограничениях.

3. Сферическая модель

Нас интересует проблема расчета радиационного поля Земли в масштабах всей планеты (одновременно при всех условиях освещения, горизонт, сумерки, область сумерек и тени, полярные регионы Арктики и Антарктиды и т.д.).

Рассматривается общая краевая задача (ОКЗ) для кинетического уравнения переноса излучения в сферической системе атмосфера-Земля (САЗ), освещаемой внешним параллельным

солнечным потоком. На основе теории передаточного оператора и метода функций влияния САЗ факторизуется на подобласти с различными оптическими свойствами и разными радиационными режимами. На основе линейно-системного подхода построено обобщенное решение задачи с оптическим передаточным оператором (ОПО), позволяющим учитывать пространственно неоднородную (мозаичную) подстилающую поверхность, а также гетерогенную структуру атмосферы (приземный слой, многоярусная облачность, стратосфера, мезосфера). Ядрами ОПО являются функции влияния. Функция влияния каждой подобласти определяется как решение первой краевой задачи (ПКЗ) для кинетического уравнения и является универсальной характеристикой системы переноса излучения, инвариантной относительно конкретных структур неоднородностей на границах, отражающих и пропускающих излучение.

Полная интенсивность монохроматического (при фиксированной длине волны λ) или квазимонохроматического (при фиксированной λ и интервале разрешения $\Delta\lambda$) стационарного излучения $\Phi_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ (индекс λ ниже опускаем) в любой точке $A(\mathbf{r})$ с радиус-вектором $\mathbf{r} = (r, \psi, \eta)$ в любом направлении $\mathbf{s} = (\vartheta, \varphi)$ находится как решение общей краевой задачи переноса излучения (ОКЗ) [5]

$$K\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s},) = F^{in}, \quad \Phi|_t = F^t, \quad \Phi|_b = \varepsilon R\Phi + F^b \quad (1)$$

в фазовой области аргументов (\mathbf{r}, \mathbf{s}) с линейным интегро-дифференциальным оператором $K \equiv D - S$, где оператор переноса

$$D \equiv (\mathbf{s}, \text{grad}) + \sigma_{tot}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

для задачи со сферической геометрией 3D-размерности

$$(\mathbf{s}, \nabla\Phi) = \cos\vartheta \frac{\partial\Phi}{\partial r} + \frac{\sin\vartheta \cos\varphi}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial\psi} - \frac{\sin\vartheta}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta} + \frac{\sin\vartheta \sin\varphi}{r \sin\psi} \frac{\partial\Phi}{\partial\eta} - \frac{\sin\vartheta \sin\varphi \text{ctg}\psi}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial\varphi}; \quad (3)$$

интеграл столкновений или функция источника есть интеграл по единичной сфере направлений $\Omega := \{\mathbf{s} = (\vartheta, \varphi)\}$

$$B(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \equiv S\Phi = \sigma_{sc}(\mathbf{r}) \int_{\Omega} \gamma(\mathbf{r}, \mathbf{s}, \mathbf{s}') \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{s}') ds', \quad ds' = \sin\vartheta' d\vartheta' d\varphi'; \quad (4)$$

оператор отражения на подстилающей поверхности в общем случае есть интеграл

$$[R\Phi](\mathbf{r}_b, \mathbf{s}) = \int_{\Omega^-} q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}^-) \Phi(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^-) ds^-, \quad \mathbf{s} \in \Omega^+. \quad (5)$$

Функция $F^{in}(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ представляет плотность источников излучения внутри сферической оболочки; $F^b(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}^+)$ и $F^t(\mathbf{r}_t, \mathbf{s}^-)$ есть источники излучения на границах, определенные для лучей \mathbf{s} , направленных внутрь сферической оболочки. Оператор R описывает закон отражения излучения от подстилающей поверхности, которая располагается на нижней границе сферической оболочки с радиус-вектором $\mathbf{r} = \mathbf{r}_b$; параметр $0 \leq \varepsilon \leq 1$ фиксирует акт взаимодействия излучения с подстилающей поверхностью. Если $R \equiv 0$ (или $\varepsilon = 0$), то имеем дело с ПКЗ

$$K\Phi_a = F^{in}, \quad \Phi_a|_t = F^t, \quad \Phi_a|_b = F^b \quad (6)$$

для сферической оболочки с неотражающими абсолютно "черными" границами или с прозрачными, "вакуумными" граничными условиями.

Радиационные проблемы требуют учета эффектов, связанных с поверхностью Земли. Проблемы энергетики и радиационного баланса Земли, когда Солнце играет роль источника излучения, обычно решаются в приближении плоского слоя без разделения вкладов атмосферной радиации и излучения земной поверхности, которое учитывают с некоторым усредненным альбедо. В нашем подходе атмосфера рассматривается как элемент "оптической" системы переноса излучения и суммарное излучение САЗ рассчитывается с использованием оптического передаточного оператора (ОПО), который формулируется на базе математического аппарата линейно-системного подхода и интеграла "суперпозиции". Общая краевая задача (1) с операторами (2)-(5) линейная относительно источников и её решение можно представить в виде су-

перпозиции: $\Phi = \Phi_a + \Phi_q$. Фоновое излучение атмосферы Φ_a определяется как решение ПКЗ (6). Вклад излучения Φ_q , обусловленного отражением от подстилающей поверхности, находится как решение ОКЗ

$$K\Phi_q = 0, \quad \Phi_q|_t = 0, \quad \Phi_q|_b = \varepsilon R\Phi_q + \varepsilon E, \quad (7)$$

в которой яркость подстилающей поверхности, созданная отраженным фоновым излучением $E = R\Phi_a$, служит источником инсоляции.

Теоретическое построение и алгоритмы расчета оптического передаточного оператора основаны на теории обобщенных решений, теории интегральных преобразований обобщенных функций и рядов общей теории регулярных возмущений (асимптотический метод, когда решение выражается в виде рядов по малому параметру). Подход, разработанный на этих строгих математических основах, называем методом функций влияния [4, 5]. Решение ПКЗ

$$K\Phi = 0, \quad \Phi|_t = 0, \quad \Phi|_b = f(\mathbf{s}^h; \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}); \quad \mathbf{r}_\perp = (\psi, \eta) \in \Omega, \quad d\mathbf{r}_\perp = \sin\psi d\psi d\eta, \quad (8)$$

можно записать в форме линейного функционала – "интеграла суперпозиции"

$$\Phi(\mathbf{s}^h; \mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}) \equiv (\Theta, f) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} ds_h^+ \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta(\mathbf{s}_h^+; \mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}', \mathbf{s}) \times f(\mathbf{s}^h; \mathbf{r}'_\perp, \mathbf{s}_h^+) \sin\psi' d\psi' d\eta'.$$

Его ядром является функция влияния $\Theta(\mathbf{s}_h^+; \mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s})$ - решение ПКЗ (Модель 1)

$$K\Theta = 0, \quad \Theta|_t = 0, \quad \Theta|_b = f_\delta$$

с параметром $\mathbf{s}_h^+ \in \Omega^+$ и источником $f_\delta(\mathbf{s}_h^+; \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}) = \delta(\mathbf{r}_\perp) \delta(\mathbf{s} - \mathbf{s}_h^+)$.

Если источник $f(\mathbf{r}_\perp)$ - изотропный (ламбертовский) и горизонтально неоднородный, то решение ПКЗ (8) есть линейный функционал – "интеграл свертки"

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}) = F_c(f) \equiv (\Theta_c, f) \equiv \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp - \mathbf{r}', \mathbf{s}) f(\mathbf{r}'_\perp) \sin\psi' d\psi' d\eta'$$

с ядром – функцией влияния

$$\Theta_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} \Theta(\mathbf{s}_h^+; \mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}) ds_h^+,$$

которая удовлетворяет ПКЗ (8) с осевой симметрией (Модель 2)

$$K\Theta_c = 0, \quad \Theta_c|_t = 0, \quad \Theta_c|_b = \delta(\mathbf{r}_\perp).$$

Для анизотропного и горизонтально однородного источника

$$\Phi(\mathbf{s}^h; r, \mathbf{s}) = F_r(f) \equiv (\Theta_r, f) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} \Theta_r(\mathbf{s}_h^+; r, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}^h; \mathbf{s}_h^+) ds_h^+$$

с ядром линейного функционала

$$\Theta_r(\mathbf{s}_h^+; r, \mathbf{s}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta(\mathbf{s}_h^+; r, r_\perp, \mathbf{s}) \sin\psi d\psi d\eta.$$

Функция влияния Θ_r есть решение одномерной сферической ПКЗ с азимутальной зависимостью (Модель 3)

$$K_r\Theta_r = 0, \quad \Theta_r|_t = 0, \quad \Theta_r|_b = \delta(\mathbf{s} - \mathbf{s}_h^+).$$

При изотропном (ламбертовом) и горизонтально однородном источнике решение ПКЗ (8)

$$\Phi(r, \mathbf{s}) = fW(r, \mathbf{s}), \quad f = \text{const},$$

рассчитывается через функцию влияния

$$W(r, \mathbf{s}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} d\mathbf{s}_h^+ \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta(\mathbf{s}_h^+; \mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}) \sin \psi d\psi d\eta =$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \Theta_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\perp, \mathbf{s}) \sin \psi d\psi d\eta = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega^+} \Theta_r(\mathbf{s}_h^+; r, \mathbf{s}) d\mathbf{s}_h^+,$$

которую называют функцией пропускания, отягощенной многократным рассеянием, и определяется как решение одномерной сферической ПКЗ со сферической симметрией (Модель 4)

$$K_r W = 0, \quad W|_r = 0, \quad W|_b = 1.$$

На основе теории регулярных возмущений с помощью ряда

$$\Phi_q(\mathbf{s}^h; \mathbf{r}, \mathbf{s}) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathcal{E}^k \Phi_k$$

ОКЗ (7) сводится к рекурсивной системе ПКЗ (8)

$$K\Phi_k = 0, \quad \Phi_k|_r = 0, \quad \Phi_k|_b = E_k \tag{9}$$

с источниками $E_k = R\Phi_{k-1}$ для $k \geq 2$, $E_1 = E$.

Вводится оператор, описывающий единичный акт взаимодействия падающего излучения с подстилающей поверхностью через функцию влияния

$$[Gf](\mathbf{s}^h; \mathbf{r}_b, \mathbf{s}) \equiv R(\Theta, f) = \int_{\Omega^-} q(\mathbf{r}_b, \mathbf{s}, \mathbf{s}^-)(\Theta, f) d\mathbf{s}^-.$$

Решения системы ПКЗ (9) находятся как линейные функционалы

$$\Phi_1 = (\Theta, E), \quad \Phi_k = (\Theta, R\Phi_{k-1}) = (\Theta, G^{k-1}E).$$

Асимптотически точное решение ОКЗ (7) получается в форме линейного функционала – оптического передаточного оператора

$$\Phi_q = (\Theta, Y),$$

где оптическое изображение "сценария" или яркость подстилающей поверхности

$$Y \equiv \sum_{k=0}^{\infty} G^k E = \sum_{k=0}^{\infty} R\Phi_k \tag{10}$$

определяется рядом Неймана по кратности отражения излучения от подстилающей поверхности с учетом многократного рассеяния внутри оболочки атмосферы. "Сценарий" (10) удовлетворяет уравнению Фредгольма второго рода $Y = R(\Theta, Y) + E$, которое называют "приземной фотографией". Полное излучение САЗ и "космическая фотография" (изображение, получаемое при наблюдении из космоса) есть "суперпозиция

$$\Phi = \Phi_a + (\Theta, Y) \tag{11}$$

Линейный функционал (11) является универсальной математической моделью переноса излучения в САЗ, адекватной исходной ОКЗ (1) для различных источников E и разных типов подстилающей поверхности не зависимо от размерности САЗ (1D, 2D, 3D). Достаточно рассчитать конечный ряд Неймана только для "сценария" (10) вместо расчета ряда многократного отражения излучения в полном фазовом объеме решения ОКЗ (1).

Общность схематически описанной методики состоит в том, что она распространяется на разные диапазоны и условия дистанционного зондирования. Важно, чтобы "сценарий" и атмосферный канал рассматривались в рамках теории переноса излучения.

4. О супервычислениях и параллельных алгоритмах

Даже на современных высокопроизводительных вычислительных системах стоят проблемы скорости вычислений и оптимальной организации распараллеливания расчета при больших размерностях разностной сетки, а также передачи больших массивов результатов расчета по сетям от суперкомпьютера к рабочей станции оператора для последующей обработки. Разработанные авторами метод функций влияния и теория передаточного оператора обладают удивительными

тельными свойствами распараллеливания вычислений и построения новых алгоритмов декомпозиции методом векторных функций влияния: исходную задачу с областью определения решения большой размерности и большим размером разностной сетки фазового пространства задачи можно факторизовать на ряд малоразмерных подзадач, определенных на подобластях и разностных сетках меньшей размерности. При этом подобласти могут отличаться радиационными режимами и в них можно использовать разные приближения и методы решения краевых задач теории переноса излучения.

Цель разработки обеспечить максимально возможную переносимость комплекса программ, 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.). 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).

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 информационно-математического обеспечения:

- банки данных по оптико-метеорологическим моделям КСЗ;
- система автоматизированного расчета спектро-энергетических и других радиационных характеристик атмосферы и Земли в различных диапазонах спектра от УФ до ММВ;
- банки данных радиационных характеристик;
- пакеты программ обработки, визуализации и диагностики результатов численного эксперимента и аэрокосмических данных.

5. Заключение

С 2004 года уже более 50 стран участвуют в международном проекте GEOSS - Глобальная Система Наблюдений Земли (ГСНЗ). В повестке дня современной цивилизации ведущее место занимают проблемы экологии и климата. Эти фундаментальные международные проекты почти такого же масштаба, как проект освоения и покорения космоса, и для его реализации чрезвычайно важно использовать приобретенный опыт и в теории и в практике при создании комплексных систем ПРО и ПВО, включая системы оперативного "землеобзора" и глобального мониторинга, принятия решения и управления с использованием суперкомпьютеров, информационных технологий и технологий Интернет, ГРИД, "облачных", ГЛОНАСС и т.п.

Работа проводится под руководством Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН совместно с Институтом оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, Институтом вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Институтом физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН, Центральной аэрологической обсерваторией, Московским физико-техническим институтом, МГУ имени М.В. Ломоносова, Новосибирским и Томским университетами.

Литература

1. Келдыш М.В. Творческий портрет по воспоминаниям современников. М.: Наука, 2001. 416 с.

2. Кузнецов Е.С. Избранные научные труды (в связи со 100-летием со дня рождения) / Отв. редактор и составитель Сушкевич Т.А. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 784 с.
3. Сушкевич Т.А. Осесимметричная задача о распространении излучения в сферической системе // Отчет № 0-572-66. М.: ИПМ АН СССР, 1966. 180 с.
4. Сушкевич Т.А., Стрелков С.А., Иолтуховский А.А. Метод характеристик в задачах атмосферной оптики. М.: Наука, 1990. 296 с.
5. Сушкевич Т.А. Математические модели переноса излучения. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. 661 с.

The radiation transfer theory and supercomputing: conjugate problems of ecology, climate, monitoring and remote sensing of Earth, hyperspectral approach and nanodiagnostics of natural environments (dedicated to the 65th anniversary of Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS)

T.A. Sushkevich¹, S.A. Strelkov¹, S.V. Maksakova, V.V. Belov², A.V. Zimovaya², V.V. Kozoderov³, S.M. Prigarin⁴, V.A. Falaleeva⁵, L.D. Krasnokutskaya⁵, B.A. Fomin⁶, G.E. Kolokutin⁶, A.S. Kuzmichev⁷, A.A. Nikolenko⁷, P.V. Strakhov⁷, B.M. Shurygin⁷

Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS¹, V.E. Zuev Institute of Atmospheric Optics of Siberian Branch of RAS², Lomonosov Moscow State University³, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of Siberian Branch of RAS⁴, A.M. Obukhov Institute of Atmospheric Physics of RAS⁵, Central Aerological Observatory⁶, Moscow Institute of Physics and Technology⁷

For the first time, the idea of considering the most complex problems of evolution, climate, ecology, global monitoring and remote sensing of the Earth with hyperspectral approaches and nanodiagnostics of the natural environment and objects as conjugate is proposed. The radiation field of the Earth is a general physical field (electromagnetic radiation) and a joining factor. For example, volcanic eruptions and transboundary transport of pollution that affect the ecology and the environment can be detected by remote sensing techniques, and further through the transfer of radiation energy, dependent on environmental pollutants, can affect the climate and ultimately the trend of the evolution of the Earth as a planet. The insurmountable complexity of the problem lies in the fact that natural experiments are not allowed for the study of the planet and can only be monitored and observed by different means, on the one hand, and on the other hand at the time of radiation measurements it is impossible to restore the entire set of optical-geophysical and optical-meteorological parameters of the "atmosphere-land-ocean" system, on which radiation depends, and it is not possible to repeat the conditions of observations, since the environment is constantly changing and never repeats itself. And only mathematical modeling of large direct and inverse problems of the radiation transfer theory with parallel supercomputing allows to carry out theoretical and computational researches of such complex problems and to obtain qualitative and quantitative estimates for analysis and forecasts, as well as for different thematic applications.

Keywords: radiation transfer, natural environment, coupled direct and inverse problems, Earth radiation field, radiation forcing, mathematical modeling, monitoring, hyperspectral remote sensing, climate, ecology, nanodiagnostics, supercomputing

References

1. Keldysh M.V. *Tvorcheskii portret po vospominaniyam sovremennikov* [Creative portrait on the memoirs of contemporaries]. Moscow, Nauka, 2001. 416 p.
2. Kuznetsov E.S. *Izbrannye nauchnye trudy (v svyazi so 100-letiem so dnya rozhdeniya). Otvet. redaktor i sostavitel' Sushkevich T.A.* [Selected scientific papers (in connection with the 100th anniversary of his birth). Editor and compiler Sushkevich T.A.]. Moscow, FIZMATLIT, 2003. 784 p.
3. Sushkevich T.A. *Osesimmetrichnaya zadacha o rasprostranении izlucheniya v sfericheskoy sisteme* [Axisymmetric problem of the propagation of radiation in a spherical system]. Moscow, Report IAM AN SSSR No. 0-572-6, 1966. 180 p.
4. Sushkevich T.A., Strelkov S.A., Ioltuhovskij A.A. *Metod harakteristik v zadachah atmosfernoj optiki* [The method of characteristics in problems of atmospheric optics]. Moscow, Nauka, 1990. 296 p.
5. Sushkevich T.A. *Matematicheskie modeli perenosa izlucheniya* [Mathematical models of radiation transfer]. Moscow, Binom. Laboratory of knowledge, 2005. 661 p.