

АНОТАЦІЯ

Яйлимова Г.О. Моделювання екологічних процесів на основі двокрокового симетризованого різницевого алгоритму та супутникових даних. - Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 113 «Прикладна математика» (11 – Математика та статистика). – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, 2021.

Екологічні проблеми планети є актуальним об'єктом досліджень, оскільки з кожним роком зростає антропогенний вплив на довкілля і збільшується кількість надзвичайних ситуацій. Однією із серйозних проблем є забруднення атмосферного повітря. Для моніторингу екологічних проблем у світі та екологічного прогнозування процесів у атмосфері використовують математичні моделі з просторово-розподіленими параметрами, для роботи яких необхідні відповідні вхідні дані – початковий стан і крайові умови. Актуальним питанням є використання саме реальних вхідних даних та їх коректна інтерпретація при моделюванні відповідних процесів. В останні роки з запуском програми Copernicus Європейського космічного агентства та активним розвитком дистанційних та наземних систем спостережень з'явилися нові джерела об'єктивних даних, які можна асимілювати в моделі екологічних процесів і підвищувати точність прогнозування розвитку процесів переносу забруднення в атмосфері. Застосування таких моделей для великих територій потребує значних обчислювальних ресурсів та розпаралелювання розрахунків. Внаслідок цього виникає потреба вдосконалення існуючих математичних моделей шляхом збільшення їх швидкодії, адаптації до багатопроцесорних обчислювальних ресурсів, а також налагодження сучасних хмарних технологій для їх використання (таких як Amazon Web Services).

Найбільш значні та успішні результати в області моделювання екологічних процесів, які описуються системами рівнянь переносу та системами рівнянь

Нав'є-Стокса були отримані в роботах закордонних авторів Неле Шувірт, Елейн Шорнобай-Луї, Мішель де Бруасія, а також в роботах українських авторів С.І. Ляшка, А.Я. Бомби, В.П. Матейчик із використанням на двокрокового симетризованого різницевого алгоритму та О.Ю. Грищенко, В.В. Оноцький та ін. Проте з розвитком новітніх технологій виникають і нові джерела даних. Зокрема, корисними в задачах моделювання перенесення забрудників у повітрі є супутникові дані якості повітря Sentinel-5p, які у вільному доступі з'явилися лише у 2018 році завдяки програмі Європейського космічного агентства Copernicus. Супутникові дані стабільно надають інформацію про стан якості повітря, на відміну від наземних станцій, оскільки наземні станції локалізовані здебільшого у великих населених пунктах. Над проблемою створення методів супутникового екологічного моніторингу атмосфери працюють Е. Gerasopoulos, Giuseppe Zibordi, а в Україні Г. Міліневський, Н. Куссуль, А. Шелестов та інші. З експоненційним збільшенням об'ємів супутникових даних виникає потреба у розробці оптимізованих математичних моделей та удосконаленні методів спільного використання супутникових та модельних даних. Одночасно виникають питання підвищення точності і збільшення швидкодії моделюючих алгоритмів. Одним із ефективних шляхів розв'язування проблеми швидкодії алгоритмів є застосування багатопроцесорних обчислювальних систем або сучасні хмарні технології, зокрема такі як Amazon Web Services.

Досвід показав, що більшість методів розв'язування прикладних задач, які є ефективними на однопроцесорних системах - малоефективні, або і зовсім непридатні для використання на багатопроцесорних комплексах. Зокрема схеми Мак-Кормака, Браїловської, Лакса-Вендроффа, Алена-Чена, Дюфорта-Франклена та низка інших. Це пояснюється тим, що чисельні методи, які використовуються на багатопроцесорних системах повинні задовольняти всім умовам коректності та точності: апроксимувати поставлену задачу, бути стійкими, відображати закони збереження на сітковій множині, задовольняти потрібну точність та бути ефективними по швидкодії, на кожному окремому процесорі, тощо. Крім того вони повинні бути ефективними при

розпаралелюванні.

Великий вклад у вивчення властивостей та побудову розв'язку систем рівнянь переносу, зокрема системи рівнянь Нав'є-Стокса, внесли О. А. Ладигенська, Р. Темам, Дж.-Л. Ліонс, П. Роуч, Г. І. Марчук, О.А.Самарський та їх учні. Ідеї запропоновані в роботах М.М.Яненко та О.М.Белоцерковського одержали подальший розвиток при застосуванні на паралельних обчислювальних комплексах. При побудові алгоритмів для паралельних обчислювальних комплексів все ширше почали використовуватись двокрокові різницеві алгоритми. Свій розвиток в напрямку застосування до багатопроцесорних систем, одержав також і двокроковий симетризований алгоритм.

Незважаючи на достатньо велику кількість робіт, запити наукового та суспільного розвитку вимагають більш широкого застосування сучасних багатопроцесорних комплексів і нових джерел даних, а отже, і розробки нових алгоритмів чисельного моделювання відповідних процесів, а також розширення застосування даного математичного апарату для більшого спектру прикладних задач, зокрема до моніторингу та моделювання екологічного стану міст з використанням супутникових даних в якості вхідних даних.

Метою дисертаційного дослідження є вдосконалення математичного апарату моделювання процесів переносу шляхом розробки двокрокового симетризованого алгоритму та застосування супутникових даних, що дасть можливість підвищити швидкодію та точність моделювання шляхом використання багатопроцесорних обчислень і геопросторових даних.

Поставлена мета обумовлює необхідність розв'язування таких основних **задач**:

- проаналізувати наявні методи чисельного моделювання розповсюдження забруднювачів у повітрі;
- побудувати алгоритми розщеплення за просторовими напрямками з використанням двокроково-симетризованого алгоритму;

- дослідити та теоретично обґрунтувати основні обчислювальні характеристики методів: порядок апроксимації, існування розв'язку;

- проаналізувати можливості розпаралелювання побудованих алгоритмів;

- адаптувати двокрокий-симетризований алгоритм для моделювання руху забруднювача в атмосфері;

- реалізувати запропонований метод для чисельного моделювання руху забруднювача в атмосфері із використанням даних із супутників в якості початкових умов;

- проаналізувати точність використання моделі для змодельованого руху забруднювача повітря, використавши аналогічні реальні дані із супутнику.

В дисертації вперше отримані такі нові **наукові результати**:

- **вперше** розроблено двокроковий чисельний алгоритм знаходження розв'язку задачі чисельного моделювання пучка типу гаусівського випромінювання в умовах теплового саморозігріву середовища. Встановлено умови існування та єдності розв'язку різницевої системи, її порядок апроксимації;

- **вперше** розроблено двокроковий чисельний алгоритм знаходження розв'язків початково-крайових задач для систем переносу (систем параболічних рівнянь другого порядку без мішаних похідних), орієнтований на використання багатопроцесорних комплексів. Встановлено умови існування та єдності розв'язку різницевої системи, її порядок апроксимації;

- **вперше** побудовано модель та інформаційну технологію асиміляції супутникових даних в модель переносу забруднювача в повітрі. Розроблений алгоритм ефективний для використання у тих випадках, коли необхідно оцінити якість повітря не лише в містах, а глобально у світі чи на рівні певної країни;

- **доведено** значущість використання ДС-алгоритму до задачі розповсюдження забруднення повітря шляхом оцінки точності моделювання концентрації забруднювача в повітрі;

- **вперше** розв'язана задача моніторингу якості повітря в місті з використанням ДС-алгоритму та визначення індикаторів цілей сталого розвитку

для аналізу ступеню деградації землі.

- **вперше** змодельовано зв'язок між екологічними процесами деградації земного покриву (зокрема, це спалювання стерні на сільськогосподарських полях) та зміною якості повітря.

Дисертаційне дослідження виконано в межах наукової теми “Математичне моделювання та оптимізація динамічних систем для оборони, екології та медицини” (№ Держреєстрації 0119U100337).

Практична цінність полягає в тому, що запропоновані в дисертації методи використано при обчисленні індикаторів цілей сталого розвитку в межах проекту ERA-Planet Horizon-2020.

За матеріалами дисертації **опубліковано** 16 робіт, з яких 6 – це статті у журналах і збірниках наукових праць, що входять до переліку фахових видань затверджених МОН України за спеціальністю дисертації або у періодичних виданнях іноземних держав (1 з них без співавторів, 1 включена до міжнародної наукометричної бази SCOPUS та 2 до бази Web of Science), та 10 – публікації у матеріалах конференцій (у тому числі, міжнародних).

Ключові слова: математичні моделі розповсюдження забрудника, двокроковий симетризований алгоритм, супутникові дані.

ANNOTATION

Yailyмова H. Modeling of ecological processes based on two-step symmetrized difference algorithm and satellite data. - Qualifying scientific work, the manuscript.

PhD thesis in the field of knowledge 11 Mathematics and Statistics in specialty 113 Applied mathematics. – (11 – Mathematics and statistics). – Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, 2021.

The ecological problems of the planet are a topical object of research, as the anthropogenic impact on the environment grows every year and the number of emergencies increases. One of the serious problems is air pollution. To monitor environmental problems in the world and environmental forecasting of processes in the atmosphere use mathematical models with spatially distributed parameters, which require appropriate input data - the initial state and boundary conditions. The topical issue is the use of real input data and their correct interpretation in modeling the relevant processes. In recent years, with the launch of the European Space Agency's Copernicus program and the active development of remote and Earth observation systems, new sources of objective data have emerged that can be assimilated into environmental processes and increase the accuracy of forecasting air pollution. The application of such models for large areas requires significant computing resources and parallelization of calculations. As a result, there is a need to improve existing mathematical models by increasing their performance, adapting to multiprocessor computing resources, and adapting modern cloud technologies for their use (such as Amazon Web Services).

The most significant and successful results in the field of modeling of ecological processes, which are described by systems of transfer equations and systems of Navier-Stokes equations, were obtained in the works of foreign authors Nele Schuwirth, Elaine Shornobay-Louis, Michel de Bruasia, as well as in Ukrainian authors S.I. Liashko, A.Ya. Bomba, V.P. Mateychik using a two-step symmetrized difference algorithm and O.Yu. Gryshchenko, V.V. Onotsky and others. However, with the development of new

technologies, new data sources are emerging. In particular, the satellite air quality data Sentinel-5p, which appeared in free access only in 2018 thanks to the program of the European Space Agency Copernicus, are useful in the tasks of modeling the transport of air pollutants. Satellite data consistently provide information on the state of air quality, in contrast to ground stations, as ground stations are located mostly in large settlements. E. Gerasopoulos, Giuseppe Zibordi are working on the problem of creating methods of satellite ecological monitoring of the atmosphere, and in Ukraine G. Milinevsky, N. Kussul, A. Shelestov and others. With the exponential increase in satellite data, there is a need to develop optimized mathematical models and improve methods for sharing satellite and model data. At the same time there are questions of increase of accuracy and increase of speed of modeling algorithms. One effective way to solve the problem of algorithm performance is the use of multiprocessor computing systems or modern cloud technologies, such as Amazon Web Services.

Experience has shown that most methods of solving application problems that are effective on single-processor systems are inefficient or completely unsuitable for use on multiprocessor systems. In particular, the schemes of McCormack, Brailovskaya, Lax-Wendroff, Alain-Chen, Dufort-Franklin and a number of others. This is due to the fact that the numerical methods used on multiprocessor systems must meet all the conditions of correctness and accuracy: to approximate the problem, be stable, reflect the conservation laws on the grid set, satisfy the required accuracy and be efficient in performance on each processor, etc. In addition, they must be effective in parallelization.

A great contribution to the study of the properties and construction of the solution of systems of transfer equations, in particular systems of Navier-Stokes equations, was made O.A. Ladyzhenskaya, R. Temam, J.-L. Lyons, P. Roach, GI Marchuk, OA Samarsky and their students. The ideas proposed in the works of MM Yanenko and OM Belotserkovsky were further developed when used on parallel computing systems. When constructing algorithms for parallel computing systems, two-step difference algorithms began to be used more and more widely. The two-step symmetrized algorithm also received the development in the direction of application to

multiprocessor systems.

Despite the large number of works, the demands of scientific and social development require greater use of modern multiprocessor systems and new data sources, and hence the development of new algorithms for numerical modeling of relevant processes, as well as expanding the use of this mathematical apparatus for a wider range of applications. to monitor and model the ecological condition of cities using satellite data as input data.

The aim of the dissertation research is to improve the mathematical apparatus of modeling transfer processes by developing a two-step symmetric algorithm and the use of satellite data, which will increase the speed and accuracy of modeling by using multiprocessor calculations and geospatial data.

This goal necessitates the solution of the following main **tasks**:

- to analyze the available methods of numerical modeling of the spread of pollutants in the air;
- to build algorithms of splitting on spatial directions with use of two-step-symmetrized algorithm;
- to investigate and theoretically substantiate the main computational characteristics of methods: the order of approximation, the existence of a solution;
- to analyze the possibilities of parallelization of the constructed algorithms;
- to adapt a two-step-symmetrized algorithm for modeling the movement of pollutants in the atmosphere;
- to implement the proposed method for numerical simulation of the movement of pollutants in the atmosphere using data from satellites as initial conditions;
- to analyze the accuracy of using the model for the simulated movement of the air pollutant, using similar real data from the satellite.

In the dissertation for the first time the following new **scientific results** are received:

- **for the first time** a two-step numerical algorithm for finding the solution of the problem of numerical modeling of a beam of Gaussian radiation in the conditions of thermal self-heating of the medium was developed. The conditions of existence and unity of the solution of the difference system, its order of approximation are

established;

- **for the first time**, a two-step numerical algorithm for finding solutions of initial-boundary value problems for transfer systems (systems of parabolic equations of the second order without mixed derivatives) was developed, focused on the use of multiprocessor complexes. The conditions of existence and unity of the solution of the difference system, its order of approximation are established;
- **for the first time** a model and information technology of assimilation of satellite data into a model of air pollutant transfer were built. The developed algorithm is effective for use in cases when it is necessary to assess air quality not only in cities, but globally in the world or at the level of a particular country;
- the significance of using the DS algorithm to the problem of air pollution propagation by estimating the accuracy of modeling the concentration of pollutants in the air is **proved**;
- **for the first time** the task of monitoring air quality in the city using the DS algorithm and determining indicators of sustainable development goals to analyze the degree of land degradation;
- **for the first time**, the relationship between the ecological processes of land degradation (in particular, the burning of stubble in agricultural fields) and changes in air quality has been modeled.

The dissertation research was performed within the scientific topic "Mathematical modeling and optimization of dynamic systems for defense, ecology and medicine" (№ State Registration 0119U100337).

The practical value is that the methods proposed in the dissertation were used in the calculation of indicators of sustainable development goals within the project ERA-Planet Horizon-2020.

Based on the dissertation, 16 works were **published**, 6 of which are articles in journals and collections of scientific papers included in the list of professional publications approved by the Ministry of Education and Science of Ukraine in the dissertation or in periodicals of foreign countries SCOPUS databases and 2 to the Web of Science database), and 10 - publications in conference proceedings (including

international ones).

Key words: mathematical models of pollutant propagation, two-step symmetrized algorithm, satellite data.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА:

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Загородня Г.О. Застосування ДС-алгоритму до розв'язування систем початково-крайових задач переносу / Г.О. Загородня / Журнал обчислювальної та прикладної математики. – 2016. – Т. 1, №121. – С. 48-53.

Здобувачем запропоновано модифікацію ДС-алгоритму для побудови чисельного розв'язку систем параболічних рівнянь. Проведено дослідження даного алгоритму, вказано на його переваги перед іншими аналогічними алгоритмами.

2. Ляшко С.І. Про один скінченно-різницевий алгоритм моделювання процесів кінетики адсорбції / С. І. Ляшко, О.Ю. Грищенко, В.С. Федорова, Г.О. Загородня // Доповіді Національної Академії Наук України. – 2016. – Т. 7. – С. 32-37.

Здобувачем запропоновано і обґрунтовано алгоритм чисельного моделювання неперервних адсорбційних процесів в багатоступеневих апаратах. Досліджено питання стійкості відносно збурення коефіцієнтів рівнянь.

3. Грищенко О.Ю. Двокроковий симетризований алгоритм для чисельного моделювання процесу розповсюдження випромінювання в деформуючому середовищі / О.Ю. Грищенко, Г.О. Загородня, В.В. Оноцький // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія кібернетики. – 2015. – Т. 1, №15. – С. 8-15.

Здобувачем запропоновано математичну модель, що описує процес розповсюдження високоенергетичних пучків випромінювання. Для чисельного моделювання запропоновано модифікацію ДС-алгоритму, досліджено його основні властивості.

4. Куссуль Н.М. Urban Atlas для міст України на основі супутникових даних високого розрізнення / Н.М. Куссуль, А.Ю. Шелестов, Б.Я. Яйлимов, Л.Л. Шуміло, Г.О. Яйлимова, М.С. Лавренюк, Л.М. Колос, Л.В. Підгородецька, Ю.В. Білоконська // Журнал «Космічна наука і технологія». – 2019. – Т. 25, № 6. – С. 51-60. 10.15407/knit2019.06.051 (Web of Science).

Здобувачем запропоновано алгоритм побудови міського атласу для міста Києва з розподілом на квартали для уточнення результатів моделювання якості в межах міста.

5. Shelestov A. Cloud Approach to Automated Crop Classification Using Sentinel-1 Imagery / A. Shelestov, M. Lavreniuk, V. Vasiliev, L. Shumilo, A. Kolotii, B. Yailymov, N. Kussul, H. Yailymova // IEEE Transactions on Big Data. – 2020. – Vol. 6, No. 3. –P. 572 – 582. 10.1109/TBDDATA.2019.2940237 (Scopus).

Здобувачем запропоновано використання багатопроекторних систем для обробки великих обсягів супутникових даних для побудови карти класифікації земного покриву.

6. Яйлимов Б.Я. Методи визначення істотних змінних для оцінки стану земного покриву / Б.Я. Яйлимов, М.С. Лавренюк, А.Ю. Шелестов, А.В. Колотій, Г.О. Яйлимова, О.П. Федоров // Космічна наука і технологія. – 2018. – Т. 24, № 4. – С. 24-37. doi.org/10.15407/knit2018.04.026 (Web of Science)

Здобувачем використані отримані карти класифікації земного покриву для оцінки екологічних показників використання землі та визначення індикаторів її деградації.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

1. Загородня Г.О. Застосування ДС-алгоритму до розв'язання систем початково-крайових задач переносу / Г.О. Загородня // Матеріали XIV Всеукраїнської науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», (26-28 травня 2016 р., м. Київ, Україна). – 2016. – Т. 2. – С. 39-41.

2. Kussul N. Along the season crop maps development using multi-temporal optical and SAR satellite imagery / N. Kussul, M. Lavreniuk, A. Shelestov, B. Yailymov, G. Yailymova // Earth observation for sustainable development and security: Materials of reports of the Fifth International Conference “GEO-UA 2016” (2016, Kyiv). - P. 7-8.
3. Яйлимова Г.О. Застосування креативних обчислень та принципу різнотипності при розв’язанні прикладних задач / Г.О. Яйлимова, В.А. Заславський // "Матеріали XV Всеукраїнської науково-практичної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», (25-27 травня 2017 р., м. Київ, Україна). - 2017 р.- т. 2, с. 87-89.
4. Yailymova H. Models and methods in creative computing: diversity and type-variety principle in development of innovation solutions / H. Yailymova, H. Yang V. Zaslavskiy // The 3rd International Symposium of Creative Computing (ISCC), (21-23 червня 2017 р., Exeter, England, UK), DOI: 10.1109/ISPAN-FCST-ISCC.2017.81 (Scopus).
5. Яйлимова Г.О. Методи краудсорсингу для валідації карт земного покриття / Г.О. Яйлимова, Б.Я. Яйлимов // 17-а Українська конференція з космічних досліджень. Тези доповідей конференції, (21-25 серпня 2017 р., м. Одеса). – К.: 2017 – ISSN 2309-2130. – С. 216.
6. Яйлимова Г.О. Можливості креативних обчислень та задачі прикладної математики / Г.О. Яйлимова, В.А. Заславський, Я. Хонжі // Конференція «Сучасні проблеми математичного моделювання, обчислювальних методів та інформаційних технологій – 2018». – С. 154-155.
7. Яйлимова Г.О. Розпізнавання зернових культур для території Казахстану / Г.О. Яйлимова // 6th Ukrainian Conference GEO-UA аерокосмічні спостереження в інтересах сталого розвитку та безпеки. – 2018. – P. 139-141.
8. Kussul N. Crop monitoring technology based on time series of satellite imagery / N. Kussul, A. Shelestov, B. Yailymov, H. Yailymova, M. Lavreniuk, L. Shumilo, Y. Bilokonska // IEEE 11th International Conference on Dependable

Systems, Services and Technologies, 14-18 May 2020 – DESSERT – Ukraine, Kyiv – 346-350 pp. (Scopus).

9. Yailymova H. New opportunities for land use analysis / H. Yailymova, N. Kussul, A. Shelestov, M. Lavreniuk // IAMO Forum 2020, 24 - 26 June 2020, Online conference.

10. Bilokonska Y. Losses assessment for winter crops based on satellite data and fuzzy logic / Y. Bilokonska, H. Yailymova, B. Yailymov, A. Shelestov, L. Shumilo and M. Lavreniuk // IEEE IDAACS-SWS 2020 conference. On-line conference 17-18 of September 2020 (Scopus).

