

Пененко Алексей Владимирович

**Математическое моделирование процессов
адвекции-диффузии-реакции с усвоением
данных наблюдений и решением обратных задач**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Пятков Сергей Григорьевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Югорский государственный университет», профессор

Танана Виталий Павлович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», главный научный сотрудник

Чеверда Владимир Альбертович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А.Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук

Защита состоится «**31**» августа 2021 г. в 15:00 на заседании диссертационного совета Д 003.015.04 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук (ИМ СО РАН) по адресу: 630090, Новосибирск, проспект Академика Коптюга, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИМ СО РАН <http://math.nsc.ru/>.

Автореферат разослан «**30**» июля 2021 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 003.015.04,

кандидат физико-математических наук

М. А. Скворцова

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Методы решения обратных задач и задач усвоения данных для моделей адвекции-диффузии-реакции имеют широкий спектр практических приложений. Важнейшим примером являются задачи оценки и прогнозирования качества воздуха. Не менее важные приложения возникают в био-медицинских направлениях, в частности, при изучении процессов развития и жизнедеятельности живых систем. В этих и других подобных случаях, изучаемые системы отличаются высокой сложностью, подвержены быстрым изменениям, а возможности измерения их характеристик затруднены или существенно ограничены.

Тем не менее необходимость знания фактических данных остается актуальной, поэтому на разработку систем получения информации затрачиваются большие средства: для геофизических приложений развертываются стационарные и мобильные сети мониторинга, запускаются новые спутники с аппаратурой, обеспечивающей получение снимков все более высокого разрешения. Прецизионные измерительные приборы выпускаются для медицинских и технических приложений. В таких условиях естественно стремиться к более эффективному использованию собираемых данных. Этой цели служит унифицированный подход к данным измерений различного типа, который позволяет объединять информацию о наблюдаемом процессе, получаемую различными измерительными системами.

Современные модели химии атмосферы могут содержать до 10^{12} переменных. Высокие размерности накладывают требования вычислительной эффективности на реализацию алгоритмов моделирующего комплекса. Поэтому при разработке численных алгоритмов важно, чтобы их исполнение можно было эффективно организовать на основе параллельных вычислительных потоков.

Степень разработанности темы исследования. Основоположниками теории обратных и некорректных задач являются А.Н. Тихонов, М.М. Лаврентьев и В.К. Иванов. Обзор классических результатов теории представлен в работах^{1,2,3}. Обратные задачи зачастую являются некорректными, поэтому

1 Морозов В. А. Линейные и нелинейные некорректные задачи // Итоги науки и техн. Сер. Мат. анализ. 1973. Т. 11. С. 129–178.

2 Engl H., Hanke M., Neubauer A. Regularization of inverse problems. Dordrecht : Kluwer, 1996.

3 Кабанихин С. И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск : Сибирское научное издательство,

требуют для своего решения применения методов регуляризации. В работах А.Б. Бакушинского, А.В. Гончарского, А.Н. Тихонова, А.С. Леонова, А.Г. Яголы, В.В. Васина, В.П. Тананы, А.Л. Агеева, М.Ю. Кокурина, А.И. Козлова, В. Kaltenbacher, A. Neubauer, O. Scherzer и их коллег представлен широкий круг алгоритмов для решения некорректных операторных уравнений. Методология исследования и решения обратных задач на основе усеченного сингулярного разложения развивается в работах В.И. Костина, В.А. Чеверды, Т.А. Ворониной и их коллег.

Для слежения за состоянием и для построения прогноза развития динамически изменяющихся систем используются алгоритмы усвоения данных. Основные известные оперативные алгоритмы усвоения данных построены на основе оптимизационных (вариационных) и динамико-стохастических методов. Обзоры представлены в работах ^{4,5}. Вариационный формализм был представлен в работе Y. Sasaki⁶ на примере уравнения адвекции. В современном виде вариационные алгоритмы усвоения данных с использованием сопряженных уравнений были сформулированы и реализованы советскими учеными В.В. Пененко и Н.Н. Образцовым⁷ в трехмерных нестационарных моделях гидротермодинамики атмосферы и позже теоретически исследованы и введены в оперативную практику F.-X. Le Dimet, O. Talagrand и P. Courtier.

Начиная с 60-тых годов прошлого века, в ИВМиМГ СО РАН сохраняется и развивается направление работ ВЦ СО АН СССР, инициатором которого был Г.И. Марчук, по постановке и решению задач физики атмосферы, океана и охраны окружающей среды. Оригинальной разработкой коллектива из ИВМиМГ СО РАН под руководством В.В. Пененко является концепция природоохранного прогнозирования и проектирования, основанная на вариационном подходе

2008.

- 4 Carrassi A., Bocquet M., Bertino L., Evensen G. Data assimilation in the geosciences: An overview of methods, issues, and perspectives // [Wiley Interdisciplinary Reviews: Climate Change](#). 2018. jul. Vol. 9, no. 5. P. e535. DOI: [10.1002/wcc.535](#).
- 5 Bocquet M., Elbern H., Eskes H., Hirtl M. et al. Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // [Atmospheric Chemistry and Physics Discussions](#). 2014. dec. Vol. 14, no. 23. P. 32233–32323. DOI: [10.5194/acpd-14-32233-2014](#).
- 6 Sasaki Y. Some basic formalisms in numerical variational analysis // [Monthly Weather Review](#). 1970. dec. Vol. 98, no. 12. P. 875–883. DOI: [10.1175/1520-0493\(1970\)098<0875:sbfinv>2.3.co;2](#).
- 7 Пененко В. В., Образцов Н. Н. Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. 1976. Т. 13, № 11. С. 3–16.

к задачам прямого и обратного моделирования⁸. Она предназначена для решения широкого круга взаимосвязанных задач окружающей среды и климата. Настоящая работа является развитием этой концепции, учитывающим как современное состояние вычислительных технологий, так и достижения в области методов решения и исследования обратных и некорректных задач.

На протяжении многих лет и в настоящее время активная разработка вариационных алгоритмов усвоения данных ведется в ИВМ РАН им. Г.И. Марчука. Значимые результаты достигнуты как в теоретических вопросах, так и в приложениях, в частности, к задачам изучения морей и океанов Г.И. Марчуком, В.И. Агошковым, В.Б. Залесным, В.П. Шутяевым и Е.И. Пармузиным с коллегами.

Для получения в рамках вариационного (оптимизационного) подхода градиентов целевых функционалов для сложных математических моделей используются сопряженные уравнения и соотношения чувствительности (тождества типа Лагранжа). Взяв за основу соотношения чувствительности, можно с их помощью построить алгоритмы, альтернативные оптимизационным. В работе Г.И. Марчука⁹, представлен подход, позволяющий обратную задачу, сформулированную в виде системы дифференциальных уравнений, свести к квазилинейному операторному уравнению. Для обратной задачи идентификации источников в модели адвекции-диффузии алгоритмы на основе ансамблей решений прямых и сопряженных уравнений представлены в работах В.В. Пененко, В.Ф. Рапуты, С.А. Солдатенко, Б.М. Десяткова, А.И. Бородулина, А.В. Старченко, Е.А. Панасенко, J.A.Pudykiewicz, J.-P. Issartel, P. Kumar, S.K. Singh, G. Turbelin, M. Sharan с коллегами; для модели адвекции-диффузии-реакции с точечными источниками и наблюдениями - в работах A.V. Mamonov и Y.-H. R. Tsai. В работе¹⁰ представлен обзор алгоритмов идентификации источников на основе агрегатов сопряженных уравнений. В работах группы М. Х. Хайруллина на основе ансамбля решений сопряженных уравнений строится производная нелинейного оператора, отображающего коэффициент в данные измерений для задачи идентификации коэффициента диффузии в моделях теории фильтрации.

8 Пененко В. В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Ленинград : Гидрометеоздат, 1981.

9 Марчук Г. И. О постановке некоторых обратных задач // Доклады Академии Наук СССР / Изд. Наука. 1964. Т. 156, № 3. С. 503–506.

10 Bieringer P. E., Young G. S., Rodriguez L. M., Annunzio A. J. et al. Paradigms and commonalities in atmospheric source term estimation methods // *Atmospheric Environment*. 2017. may. Vol. 156. P. 102–112. DOI: [10.1016/j.atmosenv.2017.02.011](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.02.011).

Алгоритмы решения различных обратных задач с использованием множества сопряженных уравнений приводятся в работах А.Л. Карчевского, А. Hasanov, M. A. Iglesias.

Для реализации численных алгоритмов возникает необходимость перейти от дифференциальной постановки задачи к дискретной. При работе с многомерными моделями успешно применяются схемы расщепления. Для аппроксимации дифференциальных уравнений адвекции-диффузии-реакции обычно используются методы конечных элементов и конечных разностей. Для моделирования химических трансформаций на основе систем обыкновенных дифференциальных уравнений разработаны разнообразные алгоритмы, в частности, алгоритм QSSA, который сохраняет неотрицательность решений и позволяет работать с разномасштабными по времени химическими реакциями. Обзор численных методов решения уравнений адвекции-диффузии-реакции содержится в монографии¹¹.

Цели и задачи диссертационной работы.

Цель работы: Разработать и реализовать общий подход к численному решению и исследованию обратных задач и задач усвоения данных для нестационарных моделей адвекции-диффузии-реакции с линейными операторами измерений на основе алгоритмов ансамблевого типа.

Задачи работы:

1. Разработать согласованные, в смысле тождества Лагранжа, наборы численных схем для решения прямых и сопряженных задач.
2. Построить и исследовать, теоретически и численно, алгоритмы усвоения данных с квазинезависимым усвоением данных на отдельных стадиях схемы расщепления.
3. Для обратных задач с линейными операторами измерений построить операторы чувствительности, связывающие вариацию данных измерений с вариациями параметров.
4. Построить, на основе формулировок обратных задач, соответствующие семейства квазилинейных операторных уравнений с использованием операторов чувствительности.
5. Разработать и реализовать алгоритм решения операторных уравнений на основе операторов чувствительности.

11 Hundsdorfer W., Verwer J. G. Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin Heidelberg : Springer, 2013.

6. Исследовать свойства разработанных алгоритмов в рамках сценарного подхода на задачах оценки загрязнения атмосферы и изучения биологических систем.

Теоретическая и практическая значимость. В теоретическом плане результаты вносят вклад в теорию и численные методы решения обратных и некорректных задач. Для обратных задач, сформулированных в виде систем дифференциальных уравнений, построены операторы чувствительности и семейства квазилинейных операторных уравнений. В результате исследования операторов получена новая информация о свойствах соответствующих обратных задач. Переход к квазилинейным операторным уравнениям позволяет применять алгоритмы, разработанные для решения некорректных нелинейных операторных уравнений, в новых областях приложений. При обеспечении достаточной успешности решения обратных задач, а также высокой производительности вычислений, специализированные алгоритмы решения обратных задач можно включать в системы усвоения данных, расширяя области применения и увеличивая эффективность таких систем.

Отлажены новые способы применения технологий параллельных вычислений при реализации алгоритмов на основе ансамблей решений сопряженных уравнений и алгоритмов с квазинезависимым усвоением на отдельных стадиях схем расщепления. Работа вносит вклад в теорию и в методы реализации численных схем. Согласованность численных схем для прямых и сопряженных задач, решаемых совместно, важна для уменьшения неконтролируемой погрешности результатов.

Результаты работы можно использовать в системах усвоения данных, работающих как с контактными измерениями, так и с изображениями: в экологии, задачах дистанционного зондирования Земли из космоса, оперативных медицинских технологиях, исследованиях по биологии развития, в технологиях неразрушающего контроля в технике и других. Такая универсальность способствует решению многих современных проблем, имеющих, в значительной степени, междисциплинарный характер. Эффективные алгоритмы усвоения данных в нелинейных моделях атмосферной химии способствуют повышению качества и обеспечению своевременности прогнозирования «химической погоды». Результаты позволят увеличить оперативность методики инвентаризации источников. Совместные работы проводились автором с коллегами из СибНИГМИ, ИОА

СО РАН и Датского Метеорологического Института. Совместно с коллегами из ИЦиГ СО РАН результаты диссертации использованы для изучения живых систем.

Методология и методы исследования. Методологической основой работы являются теория обратных и некорректных задач, теория оптимального управления, теория разностных схем, вариационный подход и теория сопряженных уравнений. Алгоритмы разрабатываются для нестационарных моделей адвекции-диффузии-реакции различной пространственной размерности и сложности моделей процессов реакции. Задача усвоения данных рассматривается как последовательность связанных обратных задач: решения предыдущих являются априорной информацией для следующих задач. Учет данных измерений осуществляется за счет идентификации выбранных параметров моделей, называемых функциями неопределенности. В качестве функций неопределенности рассматриваются или источники, или коэффициенты диффузии. При построении алгоритмов решения обратных задач используются два подхода: на основе сведения задачи к оптимизационной постановке и к семейству квазилинейных операторных уравнений с операторами чувствительности. Для решения последних применяются алгоритмы типа Ньютона-Канторовича с регуляризацией посредством усеченного сингулярного разложения и принципа невязки.

При построении численных схем используется метод расщепления по пространственным переменным и физическим процессам. Представлены варианты алгоритмов усвоения, в которых данные измерений квазинезависимо усваиваются на разных этапах расщепления. Методикой постановки численных экспериментов для проверки эффективности алгоритмов является сценарный подход, предусматривающий разработку сценариев решения прикладных задач. Вычислительное ядро реализовано на C++ с применением стандарта OpenMP в рамках объектно-ориентированной парадигмы. Язык Python используется в качестве скриптового языка для реализации сценарного подхода, проведения численных экспериментов и визуализации результатов.

Положения, выносимые на защиту:

1. Разработан метод моделирования процессов адвекции-диффузии-реакции с использованием операторов чувствительности и на основе идентификации функций неопределенности моделей по доступным данным измерений контактного типа и данным типа изображений. Получаемые модели имеют вид семейств квазилинейных операторных уравнений, что позволяет

их исследовать методами сингулярного разложения [1–7].

2. Разработаны наборы согласованных, в смысле тождества Лагранжа, дискретно-аналитических численных схем прямых и сопряженных задач для моделей адвекции-диффузии-реакции различной пространственной размерности, работающие в рамках схемы расщепления. Построены градиенты функционалов невязки и операторы чувствительности на их основе [2, 8–11].
3. Разработан алгоритм типа Ньютона-Канторовича для решения квазилинейных операторных уравнений на основе оператора чувствительности. Разработанные алгоритмы протестированы на прикладных задачах в областях моделирования химии атмосферы и живых систем. Разработана модификация алгоритма для работы в режиме усвоения данных [1, 4, 5, 7, 12].
4. Предложен безытерационный алгоритм усвоения данных для одномерной модели адвекции-диффузии и контактных данных измерений с регулируемой гладкостью функции неопределенности по пространству. Установлена связь между результатом работы алгоритма и «точным» решением задачи усвоения данных. На основе прямого алгоритма усвоения данных разработаны и протестированы алгоритмы с вариационным усвоением на одном временном шаге дискретной модели и отдельных стадиях схемы расщепления. Реализованы процедуры выбора параметров алгоритмов усвоения данных и решения обратных задач на основе метода модельного решения [13–22].
5. Разработан и реализован комплекс программ для численного решения задач обратного моделирования IMDAF (Inverse Modeling and Data Assimilation Framework), включающий процедуры подготовки входных файлов из разнородных данных (препроцессинга), вычислительное ядро, спроектированное в объектно-ориентированной парадигме и реализованное на основе стандарта OpenMP, процедуры для анализа результатов расчетов и их визуализации (постпроцессинга) [23],[24].

Научная новизна.

1. Новым является подход к моделированию процессов адвекции-диффузии-реакции на основе семейств квазилинейных операторных уравнений с операторами чувствительности и с идентификацией функций неопределенно-

сти, позволяющий единообразно работать с данными контактных измерений и данными типа изображений функции состояния.

2. Построены новые наборы согласованных, в смысле тождества Лагранжа, дискретно-аналитических численных схем решения прямых и сопряженных задач для моделей адвекции-диффузии-реакции различной пространственной размерности, работающих в рамках схемы расщепления. Новыми являются выражения для градиентов функционалов невязки и операторов чувствительности на их основе.
3. Разработаны новые алгоритмы решения квазилинейных операторных уравнений на основе операторов чувствительности. С их помощью построены новые алгоритмы решения обратных задач и усвоения данных.
4. Разработан новый безытерационный алгоритм усвоения данных контактных измерений в одномерной модели адвекции-диффузии с регулируемой гладкостью функции неопределенности по пространству.
5. На основе схемы расщепления в многомерном случае предложены новые алгоритмы усвоения данных с квазинезависимым усвоением на отдельных стадиях схемы расщепления и прямым алгоритмом усвоения на стадии адвекции-диффузии.
6. Создана новая объектно-ориентированная программная система обратного моделирования.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность подтверждается доказательствами утверждений и теорем, процедурой проведения численных экспериментов и согласием результатов с выводами других авторов.

Основные результаты диссертации были представлены в виде докладов на семинарах: «Высокопроизводительные вычисления» (ЦКП ССКЦ, НГУ) под руководством Б.М. Глинского (07.11.2019); «Физика атмосферы и океана и охрана окружающей среды» (ИВМиМГ СО РАН) под руководством В.В. Пененко и Г.А. Платова (07.11.2019, 20.02.2020); «Обратные задачи математической физики» (МГУ) под руководством А.Б. Бакушинского, А.В.Тихонравова, А.Г. Яголы (04.12.2019, 03.03.2021); «Методы решения задач вариационной ассимиляции данных наблюдений и управление сложными системами» (ИВМ РАН) под руководством В.И. Агошкова и В.Б. Залесного (05.12.2019); «Численные методы решения условно-корректных и обратных задач» (ИНГГ СО РАН) под руковод-

ством В.А. Чеверды (28.01.2020, 11.02.2020, 18.02.2020); семинаре Лаборатории обратных задач математической физики (ИМ СО РАН) под руководством М.В. Нецадима (05.02.2020); «Прикладная гидродинамика» (ИГиЛ СО РАН) под руководством В.В. Пухначева и Е.В. Ерманыюка (16.09.2020); «Теоретические и вычислительные проблемы задач математической физики» (ИМ СО РАН) под руководством А.М.Блохина (18.09.2020); «Избранные вопросы математического анализа» (ИМ СО РАН) под руководством Г.В. Демиденко (21.09.2020, 28.09.2020, 05.10.2020); «Объединенный семинар» (ИВМиМГ СО РАН) под руководством М.А. Марченко (21.01.2021), и на научных конференциях: серии международных конференций «Марчуковские научные чтения» 2018-2020 и «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» 2015-2017; серии международных молодёжных научных школ - конференций «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач» 2009-2020; серии международных конференций «European Geoscience Union» 2014-2016, 2018, 2019; «6th International Symposium on Data Assimilation» (2018); «7th Conference on Finite Difference Methods: Theory and Applications» (2018); «Large-Scale Scientific Computations (2017)»; «Тихоновские чтения» 2018; «Математика в приложениях» в честь 90-летия С.К.Годунова (2019); «Математика в современном мире», посвященной 60-летию образования Института математики (2017); серии симпозиумов «Оптика атмосферы и океана»; серии рабочих групп «Аэрозоли Сибири»; серии международных конференций «ENVIROMIS» и «CITIES» (2005-2020); «Алгоритмический анализ неустойчивых задач» (2014); «BGRS/SB» 2016, 2018, 2020; 2020 «SMB Virtual Annual Meeting»; «3rd Conference on Numerical Analysis and Scientific Computation with Applications» (2018).

Публикации. Материалы диссертации опубликованы более чем в 90 печатных работах, из них 23 статьи в рецензируемых журналах из списка ВАК и в изданиях, входящих в базы данных Web of Science и Scopus [1–23]. Имеется свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ [24].

Личный вклад автора. Содержание диссертации и положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором. У автора отсутствует конфликт интересов с соавторами по публикациям.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, библиографии и трех приложений. Общий объем диссертации

ции 289 страниц, включая 79 рисунков. Библиография включает 372 наименования на 37 страницах.

Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, сформулированы выносимые на защиту научные положения.

В **первой главе** представлены изучаемые в диссертации постановки задач прямого и обратного моделирования (обратных задач и задач усвоения данных). В п. 1.2 дана постановка прямой задачи. В п. 1.2.1 описана нестационарная модель адвекции-диффузии-реакции. Пусть $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ - достаточно гладкая аппроксимация прямоугольной пространственной области $\prod_{\xi \in \Xi} (0, X_\xi) \subset \mathbb{R}^n$, где Ξ - индексы пространственных измерений:

$$\mathbf{x} = \{x_\xi\}_{\xi \in \Xi} \in \Omega, \quad t \in (0, T), \quad T > 0, \quad \Omega_T := \Omega \times (0, T) \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

В области Ω_T определим математическую модель типа адвекции-диффузии-реакции, которая описывает процессы переноса и трансформации различных субстанций в некоторой среде. Для общности формулировок обратных задач и задач усвоения данных мы рассмотрим модель в подобласти $\Omega_{(\underline{\theta}, \bar{\theta})} = \Omega \times (\underline{\theta}, \bar{\theta})$ области Ω_T , где $(\underline{\theta}, \bar{\theta}) \subset (0, T)$. Область Ω_T соответствует $(\underline{\theta}, \bar{\theta}) = (0, T)$. Рассматривается система из N_c взаимодействующих компонентов, обозначаемых индексами l :

$$\gamma \frac{\partial \varphi_l}{\partial t} - \nabla \cdot (\text{diag}(\mu_l) \nabla \varphi_l - \mathbf{u} \varphi_l) + P_l(t, \varphi) \varphi_l = \Pi_l(t, \varphi) + f_l + r_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega_{(\underline{\theta}, \bar{\theta})}, \quad (1)$$

$$\mathbf{n} \cdot (\text{diag}(\mu_l) \nabla \varphi_l) + \beta_l \varphi_l = \alpha_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(out)} \subseteq \partial \Omega \times (\underline{\theta}, \bar{\theta}), \quad (2)$$

$$\varphi_l = \alpha_l, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(in)} \subseteq \partial \Omega \times (\underline{\theta}, \bar{\theta}), \quad (3)$$

$$\varphi_l = \varphi_l^0 + \xi_l, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = \underline{\theta}, \quad (4)$$

где $\varphi(\mathbf{x}, t)$ - вектор-функция состояния модели, обозначающая концентрации взаимодействующих веществ в точке $(\mathbf{x}, t) \in \Omega_{(\underline{\theta}, \bar{\theta})}$, φ_l - l -ый элемент вектора

φ , $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n$ - вектор скорости переноса, $\mu_l(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n$ - вектор коэффициентов диффузии. $\Gamma^{(in)}$ и $\Gamma^{(out)}$ - части границы $\partial\Omega \times (\underline{\theta}, \bar{\theta})$, на которых вектор $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ направлен внутрь области Ω или является нулевым и направлен наружу из области Ω , соответственно, $\mathbf{n}$ - внешняя нормаль к границе области, ∇ - градиент по пространственным переменным. Коэффициент $\gamma > 0$ вводится для работы в составе схем расщепления (по умолчанию $\gamma = 1$). В модели задаются (априорные) фоновые значения источников f_l и начальных данных φ_l^0 , параметры граничных условий β_l и α_l . Элементы операторов продукции и деструкции $P_l, \Pi_l : [0, T] \times \mathbb{R}_+^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}_+$ задаются моделью процессов реакции.

Разделим параметры модели на две группы. Первую условно назовем «известными» и обозначим их вектор через $\mathbf{v}$. Вторую назовем «неопределенностями» и обозначим вектор таких параметров через $\mathbf{q}$. За счет выбора вектора $\mathbf{q}$ предполагается решать обратные задачи и задачи усвоения данных. Он предназначен для учета недостатка информации о физических процессах, источниках воздействий, ошибках аппроксимаций и алгоритмов и т.д. Вектор $\mathbf{q}$ принадлежит некоторому заданному множеству Q , точный вид которого определяется содержательной постановкой задачи. Пусть для $\mathbf{v}$ и любого элемента Q система (1) – (4) имеет единственное решение φ . Обозначим оператор прямой задачи через $\varphi[\mathbf{q}]$, где φ - решение (1) – (4). Пусть $\Phi = \varphi[Q]$ - соответствующее множество допустимых решений. В зависимости от постановки конкретной задачи, состав $\mathbf{q}$ и $\mathbf{v}$ будет меняться. В п. 1.2.2 обсуждается семейство моделей различной сложности и пространственной размерности.

Ключевыми элементами разработанных алгоритмов являются сопряженные уравнения и соотношения чувствительности, представленные в п. 1.3. Они позволяют связать вариацию функции состояния с вариациями элементов вектора неопределенностей. Справедливо следующее утверждение: для любых $\mathbf{q}^{(k)} = \{\mathbf{r}^{(k)}, \mu^{(k)}, \xi^{(k)}\} \in Q$, $k = 1, 2$, и достаточно гладких $\mathbf{h}$, $\mathbf{h}^F$, если Ψ является решением сопряженной задачи

$$-\frac{\partial \Psi_l}{\partial t} - \mathbf{u} \cdot \nabla \Psi_l - \nabla \cdot (\text{diag}(\mu_l^{(1)}) \nabla \Psi_l) + \left(\mathbf{W}(t, \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}) \Psi \right)_l = h_l, (\mathbf{x}, t) \in \Omega_T,$$

$$\mathbf{W}(t, \mathbf{a}, \mathbf{b}) = \text{diag} P(t, \mathbf{a}) + \bar{\nabla} P(t, \mathbf{a}, \mathbf{b})^* \text{diag} \mathbf{b} - \bar{\nabla} \Pi(t, \mathbf{a}, \mathbf{b})^*,$$

$$\mathbf{n} \cdot \left(\text{diag}(\mu_l^{(1)}) \nabla \Psi_l + \mathbf{u} \Psi_l \right) + \beta \Psi_l = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(out)} \subset \partial\Omega \times (0, T),$$

$$\Psi_l = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Gamma^{(in)} \subset \partial\Omega \times (0, T),$$

$$\Psi_l = h_l^F, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = T,$$

то

$$\begin{aligned} & \sum_{l=1}^{N_c} \rho_l \int_{\Omega} \delta\varphi_l h_l^F d\mathbf{x} \Big|_{t=T} + \sum_{l=1}^{N_c} \rho_l \int_0^T \int_{\Omega} \delta\varphi_l h_l d\mathbf{x} dt = \sum_{l=1}^{N_c} \rho_l \int_{\Omega} \delta\xi_l \Psi_l d\mathbf{x} \Big|_{t=0} \\ & + \sum_{l=1}^{N_c} \rho_l \int_0^T \int_{\Omega} \delta r_l \Psi_l d\mathbf{x} dt + \sum_{l=1}^{N_c} \rho_l \int_0^T \int_{\Omega} (\text{diag}(\delta\mu_l) \nabla \Psi_l) \cdot \nabla \varphi_l^{(2)} d\mathbf{x} dt. \end{aligned}$$

Здесь $\delta\varphi_l = \varphi_l[\mathbf{q}^{(2)}] - \varphi_l[\mathbf{q}^{(1)}]$, $\bar{\nabla}$ обозначает оператор разделенных разностей, $\cdot^*$ - операция взятия сопряженной матрицы относительно скалярного произведения $\mathbf{a} \circledast \mathbf{b} = \mathbf{a}^T \text{diag}(\rho) \mathbf{b}$ с заданным вектором весов $\rho = \{\rho_l\}_{l=1}^{N_c}$.

В п. 1.4 обсуждаются постановки обратных задач и задач усвоения данных. В п. 1.4.1 обсуждаются используемые в работе данные измерений: точечные измерения и данные измерений типа изображений. Определим линейный оператор наблюдений $\mathbf{H}$, который связывает функцию состояния модели $\varphi^{(*)}$, соответствующую «точному» значению $\mathbf{q}^{(*)}$ ($\varphi^{(*)} = \varphi[\mathbf{q}^{(*)}]$) с результатами наблюдений

$$\mathbf{I} = \mathbf{H}\varphi^{(*)} + \delta\mathbf{I}, \quad (5)$$

где $\mathbf{I}$ - известные данные измерений, $\delta\mathbf{I}$ - функция из некоторого множества, которая представляет оценку ошибок результатов и моделей измерений. Обычно она неизвестна, но известна частичная информация о ней, например, ее норма.

В обратной задаче требуется по частичной информации о функции состояния модели (данным измерений) восстановить неизвестные функцию состояния модели и её параметры, то есть решить операторное уравнение (5) относительно $\mathbf{q}^{(*)}$ при заданных $\mathbf{I}$ и некоторой информации о $\delta\mathbf{I}$ (п. 1.4.2). Задачи усвоения данных (п. 1.4.3) рассматриваются как последовательность связанных обратных задач на подынтервалах $(0, T)$ с различными наборами данных измерений. Результаты решения предыдущих обратных задач учитываются как «априорная информация» для последующих. Математическая постановка задачи усвоения данных представлена в п. 1.4.4. В п. 1.4.5 обсуждаются особенности обратного моделирование процессов изменения химического состава атмосферы.

Во **второй главе** для дискретных аналогов задач обратного моделирования и численных алгоритмов их решения строятся согласованные численные схемы решения прямых и сопряженных задач. Численные алгоритмы базируются на аддитивно-усредненной схеме расщепления по физическим процессам и пространственным переменным (п. 2.2). В п. 2.3 представлены численные схемы для линейных уравнений адвекции-диффузии. В п. 2.3.1 приведена конечно-разностная схема на основе схемы направленных разностей. В п. 2.3.2 построена дискретно-аналитическая схема с использованием решений локально-сопряженных задач. Достоинством этой схемы является точный учет краевых условий первого, второго и третьего видов, а также возможность одновременной оценки как значений решения, так и его производных в точках сеточной области. В п. 2.3.3 проводится численное сравнение конечно-разностной и дискретно-аналитической схем. В п. 2.4 обсуждается численная схема для процессов реакции. Дискретно-аналитическая схема с использованием локально-сопряженных задач строится в п. 2.4.1. В результате получена схема типа QSSA. В п. 2.4.2 сходимость схемы изучается на примере модели «Лоренц'63». В п. 2.4.3 для построенной схемы выводится уравнение в вариациях, которое требуется для получения численной схемы для сопряженной задачи.

В п. 2.5 представлена постановка дискретной прямой задачи. В п. 2.5.1 дан алгоритм ее решения на основе схемы расщепления. В п. 2.5.2 приведен результат численного исследования сходимости алгоритма решения прямой задачи. На основе численных схем для решения прямой задачи в п. 2.6 построены согласованные с ними, в смысле тождества Лагранжа, численные схемы для решения сопряженных задач для аддитивно-усредненной схемы расщепления. Пусть схема имеет вид:

$$\begin{aligned}\delta\phi^j &= \delta\phi^0, \quad j = 1, \\ \Lambda_\xi^{j-0.5} \delta\phi_{(\xi)}^j &= B_\xi^{j-0.5} \delta\phi^{j-1} + C_\xi^{j-0.5} \delta f_{(\xi)}^{j-0.5}, \quad j = 2, \dots, N_t, \quad \xi \in \Xi, \\ \delta\phi^j &= \sum_\xi \gamma_\xi \delta\phi_{(\xi)}^j, \quad j = 2, \dots, N_t, \quad \sum_\xi \gamma_\xi = 1, \quad \gamma_\xi \geq 0.\end{aligned}$$

Если

$$\left(\Lambda_\xi^{j-0.5}\right)^* \psi_{(\xi)}^j = \frac{1}{\delta t^j} \Psi^{j+1} + h^j, \quad j = 2, \dots, N_t,$$

$$\Psi^j = \begin{cases} \sum_{\xi} \gamma_{\xi} \left(B_{\xi}^{j-0.5} \right)^* \psi_{(\xi)}^j \delta t^j, & 2 \leq j \leq N_t \\ 0, & j = N_t + 1 \end{cases},$$

то

$$\sum_{j=2}^{N_t} \langle \delta \phi^j, h^j \rangle \delta t^j = \langle \delta \varphi^1, \Psi^2 \rangle + \sum_{j=2}^{N_t} \sum_{\xi} \left\langle \delta f_{(\xi)}^{j-0.5}, \gamma_{\xi} \left(C_{\xi}^{j-0.5} \right)^* \psi_{(\xi)}^j \right\rangle \delta t^j.$$

В п. 2.7 представлены постановки дискретных обратных задач. В дискретной постановке в качестве операторов измерений рассматриваются преобразования проекционного типа с заданием набора из Ξ функций проектирования $\bar{U} = \{ \bar{\mathbf{h}}^{(\xi)} \}_{\xi=1}^{\Xi} \subset \bar{U}_{meas}$:

$$\bar{H}_{\bar{U}} \phi := \sum_{\xi=1}^{\Xi} \left\langle \bar{\mathbf{h}}^{(\xi)}, \phi \right\rangle_{\frac{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})}{e^{(\xi)}}} e^{(\xi)},$$

где $e^{(\xi)}$ - элемент канонического базиса $\mathbb{R}^{\Xi}$. Зададим некоторое значение $\mathbf{q}^{(*)} \in \bar{Q}$, которое назовем «точным решением дискретной обратной задачи», и определим вектор данных измерений:

$$\bar{I} = \bar{H}_{\bar{U}} \phi \left[\mathbf{q}^{(*)} \right] + \delta \bar{I}, \quad (6)$$

где $\delta \bar{I} \in \bar{U}_{meas}$ - погрешность измерений. Она неизвестна, но известна некоторая информация о ней, например, норма. Обозначим имеющуюся информацию о погрешности через $\bar{\delta}$. Дискретной обратной задачей назовем задачу определения $\mathbf{q}^{(*)}$ из (6) по $\bar{I}$, $\bar{\delta}$. В п. 2.8 представлены постановки дискретных задач усвоения данных как последовательности обратных задач вида (6). Для дискретных моделей окно усвоения, равное одному временному шагу, позволяет перейти от нестационарной обратной задачи к стационарной.

Третья глава посвящена разработке вариационных алгоритмов решения обратных задач и задач усвоения данных. В п. 3.2 приведены градиенты функционалов невязки обратной задачи для дифференциального (п. 3.2.1) и дискретного (п. 3.2.2) случаев. В последнем случае градиенты строятся на основе упомянутых во второй главе согласованных численных схем. Оптимизационные (вариационные) алгоритмы применяются для решения последовательности обратных задач в рамках задач усвоения данных (п. 3.3).

В англоязычной литературе есть устоявшиеся названия алгоритмов усвоения данных: 4DVAR и 3DVAR. В частности, в алгоритмах типа 3DVAR, на окнах усвоения, равных одному шагу дискретной модели, решается последовательность стационарных обратных задач. В п. 3.4 изучается алгоритм типа 3DVAR, в котором восстановление функции состояния модели проводится за счет идентификации функции неопределенности в источнике ($\mathbf{q} = r$). Пусть точное решение определяется системой

$$\phi^{(*)0} = \phi_0^{(*)}, \quad (7)$$

$$\Lambda^k \phi^{(*)k} = \phi^{(*)k-1} + \tau f^k + \tau r^{(*)k}, \quad k = 1, \dots, N_t. \quad (8)$$

Требуется найти $\{\phi^{(*)}, r^{(*)}\}$ по I^k и δ^k

$$H^k \phi^{(*)k} = I^k + \delta I^k, \quad \delta^k = \|\delta I^k\|_Y, \quad k = 1, \dots, N_t.$$

Оценки функции состояния и функции неопределенности задаются как

$$\{\phi_{[m]}^k, r_{[m]}^k\} = \begin{cases} \{\phi_{[m-1]}^k, r_{[m-1]}^k\}, & 1 \leq k \leq m-1, \\ \arg \min_{\{\phi, r\} \in \tilde{Q}^m} J_\alpha^m(\phi, r), & m = k \\ \{\phi^k[\phi_{[m]}^m, 0], 0\}, & m+1 \leq k \end{cases},$$

где

$$J_\alpha^k(\phi, r) = \|H^k \phi - I^k\|^2 + \alpha \|r\|^2, \quad \tilde{Q}^k = \{\{\phi, r\} | \Lambda^k \phi = \phi^{k-1} + \tau f^k + \tau r\},$$

H^k - оператор измерения, α - параметр регуляризации, Λ^k - оператор модели в дискретной форме, $\phi[\phi^0, r]$ - решение (7), (8) при начальных данных ϕ^0 и функцией неопределенности в источниках r . Нижний индекс $[m]$ указывает на количество имеющихся при построении траектории данных измерений (к моменту m), а верхний - номер шага на временной сетке модели. В п. 3.4.1 обсуждаются различные способы совместного использования моделей и данных наблюдений. Алгоритм решения задачи последовательного усвоения данных на основе метода множителей Лагранжа конструируется в п. 3.4.2. В п. 3.4.3 в терминах сингулярного разложения оператора $\tau H^k (\Lambda^k)^{-1}$ изучается связь между результатом работы алгоритма и точным решением задачи усвоения данных.

В п. 3.4.4, для одномерной линейной модели адвекции-диффузии и данных

контактных измерений, вариационный алгоритм сводится к решению трехдиагонального матричного уравнения. Точка минимума функционала

$$J_{\alpha}^k(\phi, \mathbf{r}) = \sigma \sum_{i=1}^N \left(\frac{\phi_i - \tilde{I}_i^k}{\tilde{\sigma}_i^k} \right)^2 M_i^k + \alpha_n \sum_{i=1}^N \left(r_i - r_i^{(b)k} \right)^2 + \alpha_d \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{r_{i+1} - r_i}{\Delta x} \right)^2, \quad (9)$$

на ограничениях

$$-L_i \phi_{i-1}^k + C_i \phi_i^k - R_i \phi_{i+1}^k = \phi_i^{k-1} + \tau F_i^k + \tau r_i^k, \quad i = 1, \dots, N,$$

где $L_1 = R_N = 0$, определяется трехдиагональной матричной системой уравнений, которая решается матричной прогонкой. Коэффициенты L_i, C_i, R_i, F_i^k определяются численной схемой для одномерного уравнения адвекции-диффузии, M_i^k - индикаторная функция точек измерения, $\sigma, \alpha_n, \alpha_d$ - параметры усвоения, $r_i^{(b)k}$ - априорное значение r_i^k , $\tilde{\sigma}_i^k$ - оценка точности измерений. Если рассматривать один временной шаг дискретной модели трансформации, то на основе явной дискретно-аналитической численной схемы можно построить прямой алгоритм вариационного усвоения данных (п. 3.4.5).

В п. 3.5 рассматривается алгоритм усвоения для многомерной модели адвекции-диффузии-реакции, в котором усвоение данных проводится квазинеzáвисимо на отдельных стадиях схемы расщепления. Такой подход позволяет комбинировать на различных стадиях схемы расщепления алгоритмы решения обратных задач для оценки функции состояния модели. Описание алгоритма приведено в п. 3.5.1. В п. 3.5.2 алгоритм тестируется для случая пассивных примесей в многомерной модели адвекции-диффузии (Рисунок 1).

В п. 3.5.3 показан пример работы алгоритма для модели, учитывающей трансформации, однако с усвоением данных только на стадии переноса. В п. 3.5.4 представлены результаты работы алгоритма с усвоением на стадии адвекции-диффузии прямым алгоритмом из п. 3.4.4 и усвоением на стадии трансформации прямым алгоритмом из п. 3.4.5. Во всех трех случаях алгоритм работает без итераций. В п. 3.6.1 описан «компози́тный» алгоритм, в котором усвоение на стадиях переноса осуществляется прямым алгоритмом, а на стадиях трансформации задачи идентификации источников решаются градиентными итерационными алгоритмами. Пример работы алгоритма представлен в п. 3.6.2 (одномер-

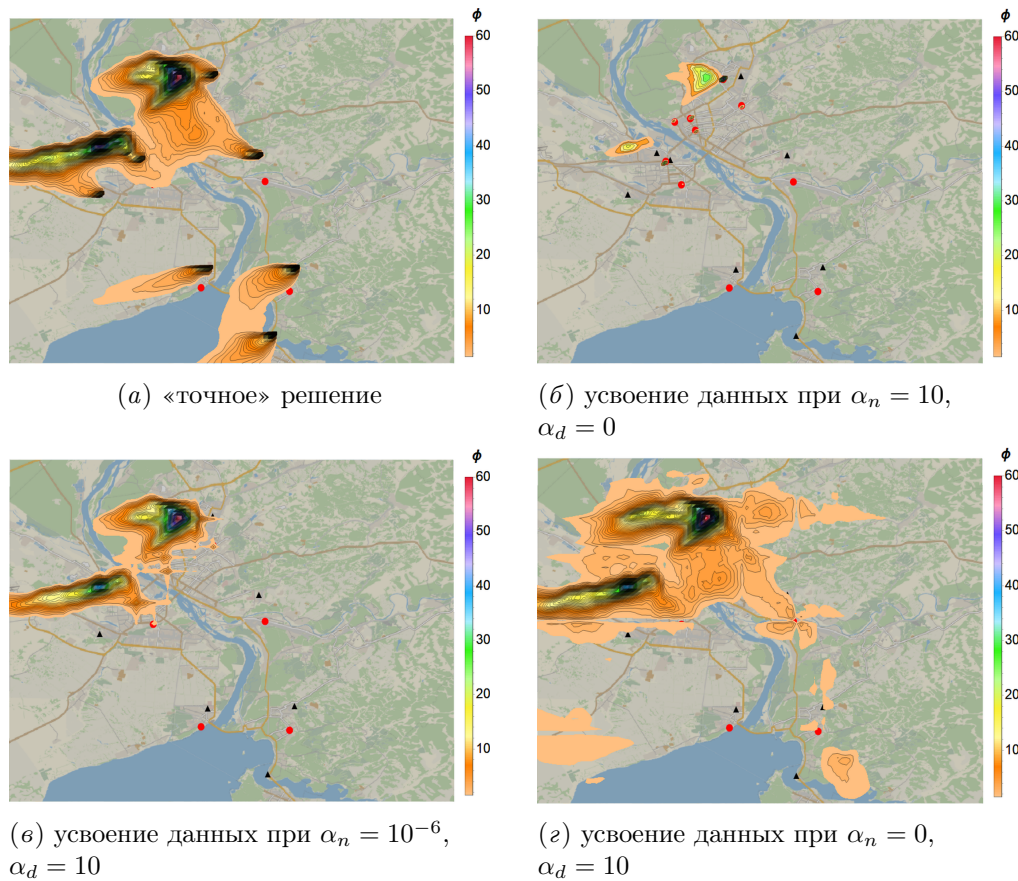


Рис. 1. Результаты восстановления поля концентрации $[\text{кг}/\text{м}^3 \cdot 10^{-9}]$ (точное решение представлено на графике (а)) при различных значениях параметров регуляризации (б)–(г) в заданный момент времени $t = 11.64$ ч., когда проводилось усвоение данных измерений. Показаны значения концентраций выше $1,5 \cdot 10^{-9} \text{ кг}/\text{м}^3$

ный случай) и 3.6.4 (трехмерный случай). Численное сравнение алгоритмов из п. 3.5.4 и п. 3.6.1 проведено в п. 3.6.3.

В п. 3.6.5 обсуждаются свойства построенных алгоритмов с усвоением на отдельных стадиях схемы расщепления. В численных экспериментах построенные алгоритмы позволили улучшить оценку функции состояния относительно решения без усвоения. Другим их достоинством является естественное представление в виде параллельных вычислительных потоков, в которых решаются локальные обратные задачи на различных стадиях схемы расщепления.

В алгоритмы усвоения данных вводятся различные дополнительные параметры, влияющие на их работу, например, параметры регуляризации α_n и α_d в (9). Следовательно, возникает вопрос об их выборе. В п. 3.7.1 представлен пример алгоритма выбора параметра регуляризации в алгоритмах усвоения данных на основе метода модельного решения. В п. 3.7.2 построен и протестирован алгоритм усвоения данных на основе алгоритма из п. 3.4.4, когда параметр регуляризации выбирается так, чтобы результат работы алгоритма приближался

к модельному решению. В п. 3.7.3 представлен двухстадийный алгоритм, в котором сначала модельное решение в параметрической форме подбирается по данным измерений, а затем параметры регуляризации выбираются так, чтобы результат работы алгоритма приближался к построенному таким образом модельному решению.

В четвертой главе представлены алгоритмы решения обратных задач и задач усвоения данных на основе ансамблей решений сопряженных уравнений и операторов чувствительности. В п. 4.2.1 приводится общая схема построения оператора чувствительности. Рассмотрим в качестве линейного оператора измерений $\mathbf{H}$, оператор проектирования на линейное подпространство U_{meas} . Тогда в общей постановке обратной задачи требуется относительно $q^{(*)}$ решить операторное уравнение

$$I = \Pr_{U_{meas}} \varphi [\mathbf{q}^{(*)}] + \delta I. \quad (10)$$

Здесь данные I известны, погрешность δI точно неизвестна, однако известна некоторая информация о ней, например, норма или норма проекции на некоторую систему функций.

Пусть для некоторой функции $\mathbf{h}$ имеется соотношение чувствительности, связывающее вариацию функции состояния модели $\varphi [\mathbf{q}]$ с вариацией функции неопределенности $\mathbf{q}$:

$$\langle \varphi [\mathbf{q}^{(2)}] - \varphi [\mathbf{q}^{(1)}], \mathbf{h} \rangle_{\Phi} = \langle S [\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; \mathbf{h}], \mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)} \rangle_Q, \quad (11)$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Phi}$ и $\langle \cdot, \cdot \rangle_Q$ - заданные скалярные произведения в пространствах функций состояния и функций неопределенности, соответственно, $S [\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; \mathbf{h}]$ - функция чувствительности (см. п. 1.3). Если задана некоторая конечная система функций проектирования $U = \{\mathbf{h}^{(\xi)}\}_{\xi=1}^{\Xi}$, ($\Xi = |U|$), то, объединяя соотношения (11), получаем оператор чувствительности

$$M_U[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}] : \begin{cases} Q \rightarrow \mathbb{R}^{\Xi} \\ \mathbf{q} \mapsto \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle S [\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}; \mathbf{h}^{(\xi)}], \mathbf{q} \rangle_Q e^{(\xi)} \end{cases},$$

такой, что

$$H_U \varphi [\mathbf{q}^{(2)}] - H_U \varphi [\mathbf{q}^{(1)}] = M_U[\mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(1)}] (\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}),$$

где $e^{(\xi)}$ - элементы канонического базиса $\mathbb{R}^\Xi$,

$$H_U \varphi := \sum_{\xi=1}^{\Xi} \left\langle \varphi, \mathbf{h}^{(\xi)} \right\rangle_{\Phi} e^{(\xi)}.$$

Если $U \subset U_{meas}$, то тогда для любых U и $q \in Q$ выполнено соотношение

$$M_U[\mathbf{q}^{(*)}, \mathbf{q}] \left(\mathbf{q}^{(*)} - \mathbf{q} \right) = H_U I - H_U \varphi[\mathbf{q}] - H_U \delta I, \quad (12)$$

в котором участвует точное значение $\mathbf{q}^{(*)}$ функции неопределенности. Таким образом, построено параметрическое семейство квазилинейных операторных уравнений (12), множества решений которых содержат множество решений (10). Представление (12) можно использовать для предварительной оценки решения обратной задачи на основе линейной теории (п. 4.2.2).

В п. 4.2.3 обсуждаются различные способы построения ансамбля решений сопряженных уравнений, определяемых системой проектирования данных измерений U . Приводятся способы оптимизации ансамбля. В п. 4.2.4 приводятся примеры операторов чувствительности в дифференциальном и дискретном случаях на основе согласованных численных схем. Оператор измерений определяет источники в сопряженной задаче, а выбор функций неопределенности задает, какой агрегат решения прямой и сопряженной задачи, называемый функцией чувствительности, используется.

Алгоритм типа Ньютона-Канторовича для полученных с помощью операторов чувствительности квазилинейных уравнений описан в п. 4.3. Он строится на основе представления

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{\bar{U}}[\mathbf{q}, \mathbf{q}] \left(\mathbf{q}^{(*)} - \mathbf{q} \right) &= (\bar{\mathbf{I}} - \bar{H}_{\bar{U}} \phi[\mathbf{q}]) - w_U[\mathbf{q}^{(*)}, \mathbf{q}, \delta I], \\ w_U[\mathbf{q}^{(*)}, \mathbf{q}, \delta I] &= \left(\mathbf{m}_{\bar{U}}[\mathbf{q}^{(*)}, \mathbf{q}] - \mathbf{m}_{\bar{U}}[\mathbf{q}, \mathbf{q}] \right) \left(\mathbf{q}^{(*)} - \mathbf{q} \right) + \delta I, \end{aligned}$$

где $\mathbf{m}_{\bar{U}}$ - дискретный аналог оператора чувствительности. Для обращения плохо обусловленной матрицы оператора чувствительности $\mathbf{m}_{\bar{U}}[\mathbf{q}, \mathbf{q}]$ используется регуляризация на основе усеченного сингулярного разложения с постепенным уменьшением регуляризующего эффекта.

В п. 4.4 показаны примеры применения построенного алгоритма к различным задачам обратного моделирования. В п. 4.4.1 алгоритм протестирован на

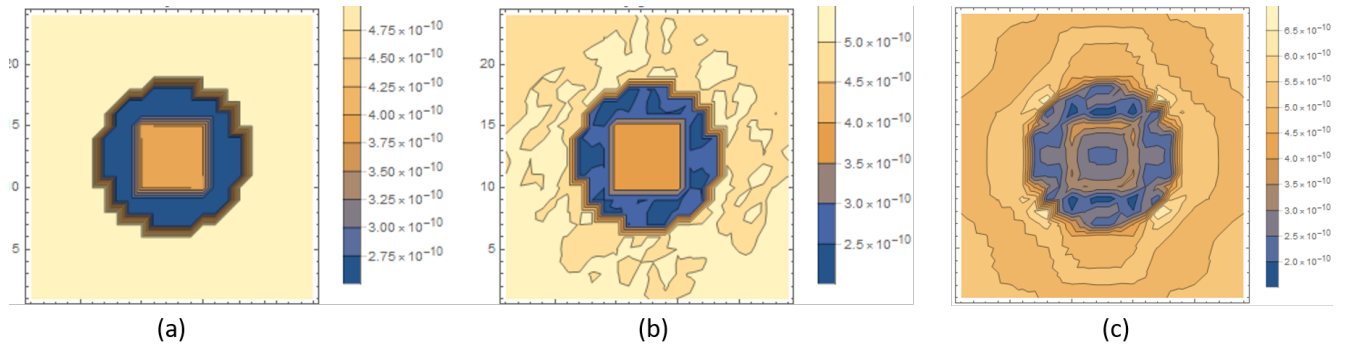


Рис. 2. Сравнение решений задачи идентификации коэффициента диффузии по снимкам полей концентрации для двумерной диффузионной модели ($N_c = 1$): «точного» (а), полученного алгоритмом на основе оператора чувствительности (б), с дополнительным 10% шумом в данных (с).

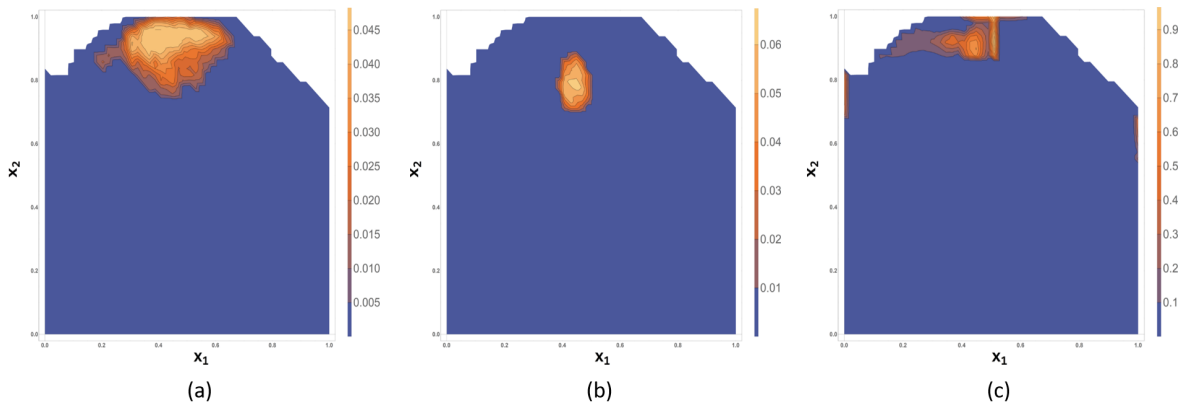


Рис. 3. Доступные снимки полей концентраций морфогенов C (а) и W (б) в финальный момент времени и восстановленное по ним поле функции источника r_γ для задачи идентификации источников в двумерной модели с $N_c = 3$ и операторами продукции типа сигмоидных функций.

задаче идентификации источников для 0-мерной модели «Лоренц'63» ($N_c = 3$). В п. 4.4.2 показан пример поиска источников для модели химии атмосферы с $N_c = 22$. В п. 4.4.3 рассматривается задача об идентификации коэффициента диффузии по снимкам полей концентрации (Рисунок 2) для двумерной диффузионной модели ($N_c = 1$). В п. 4.4.4 алгоритм применяется для решения задачи идентификации области синтеза одних морфогенов по снимкам полей концентраций других морфогенов (Рисунок 3) для двумерной модели с $N_c = 3$. В п. 4.4.5 приведен пример решения задачи идентификации источников загрязнений по данным контактного мониторинга (Рисунок 4) для двумерной модели химии атмосферы с $N_c = 22$. В п. 4.4.6 аналогичная задача решается с данными измерений в виде снимков полей концентраций. На Рисунке 5 показаны параметры сходимости алгоритма в зависимости от количества функций проектирования. В п. 4.4.7 на основе разработанного алгоритма решена задача усвоения данных

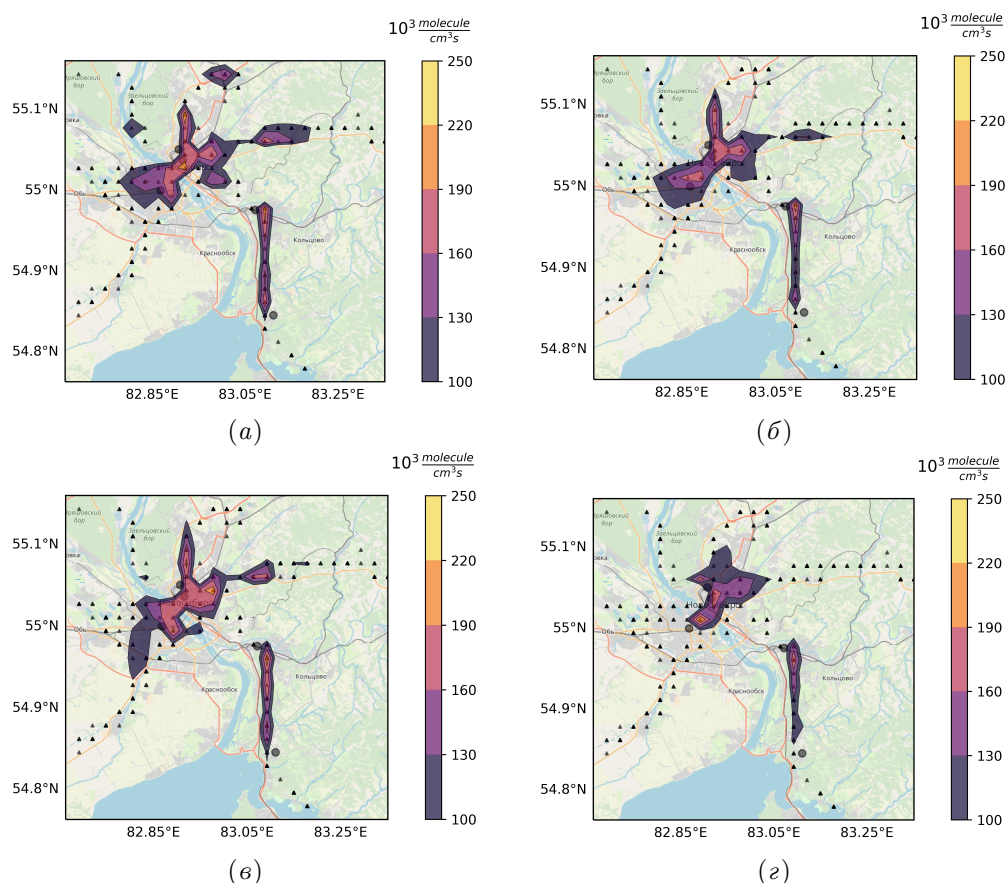


Рис. 4. Восстановление неизвестного источника, отмеченного треугольниками, по измерениям концентраций выбрасываемого вещества NO (а),(б), и по измерениям концентраций вторичного загрязнителя O_3 (в),(г); (а),(в) - проекция «точного» источника на ортогональное дополнение к ядру оператора чувствительности, (б),(г) – источник, восстановленный по результатам решения обратной задачи.

(Рисунок 6) для двумерной модели химии атмосферы с $N_c = 22$, неопределенностями в источниках NO и данными измерений концентраций O_3 .

В **пятой главе** представлено описание системы моделирования и комплекса программ. Система реализована на основе объектно-ориентированного подхода. В п. 5.2 описываются основные классы системы. В п. 5.3 обсуждаются вопросы распараллеливания разработанных алгоритмов. В п. 5.4 перечислены форматы ввода-вывода. В п. 5.5 обсуждаются особенности приложения комплекса программ к задачам химии атмосферы. В п. 5.6 дана сводка прикладных программ в составе разработанного комплекса.

В **Заключении** подводятся итоги работы и приводятся основные выводы.

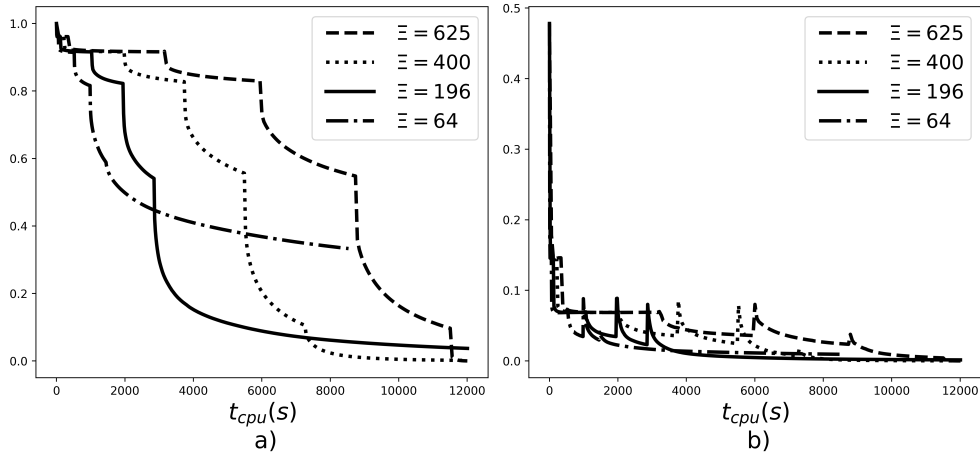


Рис. 5. Относительная ошибка а) и относительная невязка б) восстановления источника по снимкам полей концентраций для различных количеств Ξ функций проектирования.

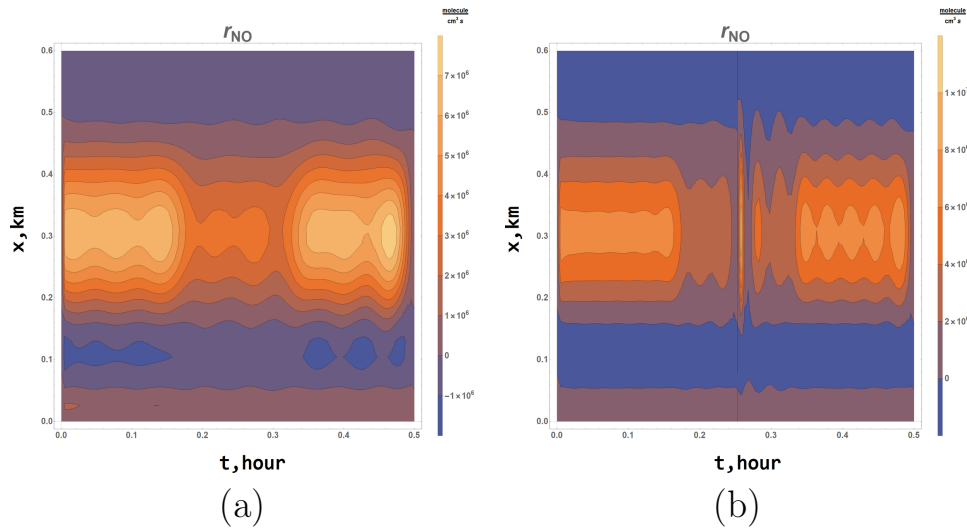


Рис. 6. Восстановленный алгоритмом на основе оператора чувствительности по снимкам полей концентраций одного вещества источник другого вещества как решение обратной задачи (а) и как решение задачи усвоения данных с двумя окнами усвоения (б).

Заключение

Актуальность данной работы подтверждается разнообразием приложений для задач математического моделирования процессов адвекции-диффузии-реакции, в том числе в области охраны окружающей среды и в различных биомедицинских приложениях. При этом важно принимать во внимание не только имеющиеся математические модели, но и реально доступные для изучаемых объектов и процессов данные измерений, то есть разрабатывать методы математического моделирования на основе совместного использования моделей и данных наблюдений (обратного моделирования).

Для постановки задач рассматривались следующие основные объекты: модели процессов, связывающие основные переменные и параметры задачи (рас-

сматриваются нестационарные многокомпонентные модели адвекции-диффузии-реакции); модели измерений, связывающие данные измерений с переменными моделей процессов (рассматриваются линейные операторы измерений, описывающие локализованные в пространстве и времени измерения); параметры моделей делятся на «известные» и на функции неопределенностей, за счет модификации которых решаются задачи обратного моделирования; искомые или оцениваемые элементы моделей.

Базовыми теоретическими конструкциями, используемыми в работе, является соотношение чувствительности и сопряженные уравнения. Они связывают вариацию функции состояния модели с вариацией функции неопределенности задачи посредством функции чувствительности. Выбор модели определяет вид сопряженного уравнения, выбор функции неопределенности задает вид функции чувствительности, а выбор типа данных измерений определяет расположения источников в сопряженном уравнении. При этом сохраняется общий вид соотношений чувствительности, что и обеспечивает универсальность его применения.

Соотношения чувствительности и сопряженные уравнения часто применяются для вычисления градиентов функционалов невязки при решении обратных задач и задач усвоения данных вариационными алгоритмами. Оно может также использоваться для построения оператора чувствительности. Для этого задается набор функций проектирования вариаций функции состояния и для каждой такой функции решается сопряженное уравнение (параллельно по набору). Оператор чувствительности формируется из соответствующего набора функций чувствительности. Основное внимание в работе уделено случаю, когда данных измерений настолько «много», что имеющихся вычислительных ресурсов недостаточно для решения ансамбля сопряженных уравнений для каждого элемента данных. В этом случае определяется оператор «извлечения структуры», который из всего объема данных выделяет некоторые «характерные особенности», для которых и строится оператор чувствительности. Кроме контроля размерности оператора чувствительности, такой подход позволяет, например, «отфильтровать» шум.

С помощью оператора чувствительности для любой системы проектирования можно записать квазилинейное операторное уравнение, множество решений которого содержит множество решений исходной обратной задачи. К тако-

му виду приводятся обратные задачи, в которых модели процессов и измерений допускают соотношение чувствительности. В дальнейшем можно обобщить подход на нелинейные операторы измерений, на данные интегрального типа и на модели процессов других типов.

Важным вопросом является выбор системы проектирования: с одной стороны, она должна «достаточно точно» описывать имеющиеся данные измерений, а с другой - быть «не очень большой». При ее построении сначала определяется некоторый базовый набор, из которого выбирается конечное подмножество. В работе предложены эмпирические процедуры оптимизации системы проектирования, основанные на сингулярном разложении матрицы оператора чувствительности и на проекциях начальной невязки обратной задачи. В дальнейшем можно рассмотреть другие процедуры построения и оптимизации системы проектирования, изучить возможность построения глобально сходящегося алгоритма за счет конструкции системы проектирования. Разработанный подход к математическому моделированию на основе совместного использования численных моделей и данных наблюдений позволяет разделить решение широкого круга прикладных обратных задач на два этапа: построение семейства квазилинейных операторных уравнений с оператором чувствительности и решение полученных квазилинейных уравнений подходящим методом.

Для того, чтобы построить дискретные аналоги операторов чувствительности и градиентов функционалов невязки, численные схемы для сопряженных уравнений строятся согласованно со схемами решения прямых задач так, чтобы соотношения чувствительности точно выполнялись и на дискретном уровне. Для построения численных схем моделей адвекции-диффузии-реакции используется аддитивно-усреднённая схема расщепления по пространственным переменным и физическим процессам. Для реализации стадии адвекции-диффузии используются неявные схемы направленных разностей и дискретно-аналитические схемы по пространству. Последние строятся с использованием локально-сопряженных задач, имеют гладкие коэффициенты и позволяют точно учитывать краевые условия всех известных типов. Для процессов реакции дискретно-аналитические численные схемы строятся с использованием локально-сопряженных задач по времени. Эти схемы автоматически обеспечивают неотрицательность решения при неотрицательных операторах продукции и деструкции. В работе используются схемы первого порядка по времени, а в дальнейшем

планируется использовать схемы с более высоким порядком.

Квазилинейный вид операторного уравнения позволяет естественно представить его в виде линейной и нелинейной частей. На основе этого разложения в работе предложен алгоритм типа Ньютона-Канторовича с тремя уровнями вложенных итераций и с регуляризацией процедуры обращения матрицы оператора чувствительности на основе усеченного сингулярного разложения. Для работы с зашумленными данными используется итерационная регуляризация с остановкой по принципу невязки. Длина шага может выбираться исходя из монотонного убывания функционала невязки. Для учета априорных ограничений на функцию неопределенности используется проектирование. В дальнейшем можно продолжить исследование и усовершенствование алгоритма: изучить способы выбора шага параметра регуляризации на верхнем уровне, добавить еще один уровень итераций по системе функций проектирования, разработать алгоритмы, которые используют явный вид нелинейной части.

Достоинством подхода является то, что квазилинейная структура получаемых уравнений позволяет использовать методы анализа линейных операторов, в том числе сингулярное разложение, для исследования свойств обратной задачи. Например, изучать ортогональное дополнение к ядру оператора чувствительности. Это уже используется в текущей работе автора для анализа систем мониторинга. Подход показал свою эффективность на ряде обратных задач для моделей различной пространственной размерности и сложности систем реакций для задач охраны окружающей среды и изучения живых систем. В том числе и на задачах с реальными данными измерений. В дальнейшем планируется внедрение разработки в более широкий круг приложений.

Если данные измерений поступают в процессе работы алгоритма, то вместо одной обратной задачи нужно рассматривать последовательность обратных задач, определяемых последовательностью временных интервалов, называемых окнами усвоения. При этом результат решения предыдущих обратных задач можно использовать как априорную информацию для последующих. Задачи такого типа мы называем задачами усвоения данных. Алгоритмы на основе операторов чувствительности были протестированы в режиме усвоения данных.

В реалистичных постановках, данных измерений для восстановления выбранной функции неопределенности может быть недостаточно. Тогда задача идентификации функции неопределенности может рассматриваться как вспо-

могательная для оценки функции состояния модели. Это позволяет снизить требования на точность восстановления функции неопределенности. Еще одно упрощение состоит в выборе окна усвоения равным одному шагу дискретизованной модели процессов. Тогда можно рассматривать последовательность стационарных обратных задач. Рассмотрение приближенных постановок обратных задач позволяет строить более быстрые алгоритмы усвоения данных. В работе численно исследован алгоритм усвоения данных, когда функции неопределенности в источниках считаются независимыми для разных стадий схемы расщепления. Оценка функции состояния модели формируется агрегированием результатов вычисления стадий схемы расщепления. В силу независимости обратных задач, алгоритм может быть эффективно распараллелен.

Для линейной стадии адвекции-диффузии и контактных данных измерений предложен алгоритм без итераций решения задачи вариационного усвоения данных со стабилизатором в целевом функционале, содержащим как норму функции неопределенности, так и норму ее пространственной производной. Такой набор стабилизаторов позволяет регулировать вид решения так, чтобы оно соответствовало или более редким, или более распространенным загрязнителям. При этом задача условной минимизации целевого функционала сводится к решению трехдиагонального матричного уравнения. Для этой схемы было установлено соотношение между точным решением задачи усвоения данных и результатом работы алгоритма. Для нелинейной стадии трансформации можно использовать как прямой алгоритм, так и итерационный оптимизационный. Во втором случае алгоритм оказывается более затратным в вычислительном плане, однако он позволяет более точно учесть свойства нелинейной модели. Алгоритм был протестирован в рамках сценарного подхода для задач усвоения данных мониторинга загрязнения атмосферы с моделями различной пространственной размерности и различными моделями трансформации. В численных экспериментах он показал свою эффективность при оценке функции состояния модели. В дальнейшем можно разработать модификацию алгоритма с более точной оценкой общей функции неопределенности.

Результат работы алгоритма усвоения данных существенно зависит от выбора параметров усвоения. Работа с конкретными приложениями позволяет привлечь априорную информацию о «типичных решениях» задачи усвоения данных. Для выбора параметров усвоения реализованы одностадийная и двух-

стадийная процедуры подбора параметров на основе метода модельного решения. Одностадийная процедура применима, когда модельное решение непосредственно известно, а в двухстадийной процедуре сначала идентифицируется некоторая «грубая» модель, и уже с ее помощью генерируется модельное решение. В дальнейшем можно рассмотреть построение гибридных алгоритмов усвоения данных и машинного обучения, в том числе и для увеличения точности восстановления функции неопределенности.

Алгоритмы реализованы в рамках комплекса программ IMDAF (Inverse Modeling and Data Assimilation Framework), вычислительное ядро которого разработано в объектно-ориентированной парадигме и реализовано на C++ с использованием стандарта OpenMP. В дальнейшем его можно реализовать на других параллельных архитектурах. Ввод и вывод данных в ядро проводится в формате NetCDF. Система подготовки входных данных («препроцессинга»), обработки результатов расчетов («постпроцессинга») и их визуализации реализована на языке Python. Перспективной задачей является реализация ядра также на Python, а всей системы в виде проблемно-ориентированных веб-сервисов.

Таким образом, в результате разработан и реализован общий подход к численному решению обратных задач и задач усвоения данных для многокомпонентных нестационарных моделей адвекции-диффузии-реакции на основе алгоритмов ансамблевого типа с использованием теории чувствительности и сопряженных уравнений.

Список основных публикаций автора по теме диссертации

I. Статьи в журналах, входящих в перечень ВАК, базы данных Web of Science и Scopus:

1. Пененко А. В., Николаев С. В., Голушко С. К., Ромащенко А. В., Кирилова И. А. Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии // [Математическая биология и биоинформатика](#). 2016. Т. 11, № 2. С. 426–444. DOI: [10.17537/2016.11.426](#).
2. Пененко А. В. Согласованные численные схемы для решения нелинейных обратных задач идентификации источников градиентными алгоритмами и

- методами Ньютона-Канторовича // [Сибирский журнал вычислительной математики](#). 2018. Т. 21, № 1. С. 99–116. DOI: [10.15372/SJNM20180107](#).
3. Пененко А. В. Метод Ньютона-Канторовича для решения обратных задач идентификации источников в моделях продукции-деструкции с данными типа временных рядов // [Сибирский журнал вычислительной математики](#). 2019. Т. 22, № 1. С. 57–79. DOI: [10.15372/SJNM20190105](#).
 4. Пененко В. В., Пененко А. В., Цветова Е. А., Гочаков А. В. Методы исследования чувствительности модели качества атмосферы и обратные задачи геофизической гидротермодинамики // [Прикладная механика и техническая физика](#). 2019. Т. 60, № 2. С. 238–246. DOI: [10.15372/PMTF20190220](#).
 5. Penenko A., Zubairova U., Mukatova Z., Nikolaev S. Numerical algorithm for morphogen synthesis region identification with indirect image-type measurement data // [Journal of Bioinformatics and Computational Biology](#). 2019. Vol. 17, no. 01. P. 1940002–1–1940002–18. DOI: [10.1142/s021972001940002x](#).
 6. Пененко А. В., Салимова А. Б. Идентификация источника в уравнении Смолуховского с использованием ансамбля решений сопряженного уравнения // [Сибирский журнал вычислительной математики](#). 2020. Т. 23, № 2. С. 183–199. DOI: [10.15372/sjnm20200206](#).
 7. Penenko A. Convergence analysis of the adjoint ensemble method in inverse source problems for advection-diffusion-reaction models with image-type measurements // [Inverse Problems & Imaging](#). 2020. Vol. 14, no. 5. P. 757–782. DOI: [10.3934/ipi.2020035](#).
 8. Пененко А. В. Дискретно-аналитические схемы для решения обратной коэффициентной задачи теплопроводности слоистых сред градиентными методами // [Сибирский журнал вычислительной математики](#). 2012. Т. 15, № 4. С. 393–408.
 9. Пененко А. В., Троеглазова Т. С., Зубаирова У. С., Байшибаев Д. Ж., Николаев С. В. Применение технологии CUDA для моделирования процессов реакции-диффузии на двумерном клеточном ансамбле // [Математическая биология и биоинформатика](#). 2014. Т. 9, № 2. С. 491–503. DOI: [10.17537/2014.9.491](#).
 10. Пененко А. В., Сороковой А. А., Сороковая К. Е. Численная модель трансформации биоаэрозолей в атмосфере // [Оптика атмосферы и океана](#). 2016.

- T. 29, № 6. С. 462–466. DOI: [10.15372/A0020160602](https://doi.org/10.15372/A0020160602).
11. Penenko A., Penenko V., Tsvetova E., Mukatova Z. [Consistent discrete-analytical schemes for the solution of the inverse source problems for atmospheric chemistry models with image-type measurement data](#) // Finite Difference Methods. Theory and Applications. Springer International Publishing, 2019. Lecture Notes in Computer Science. P. 378–386. DOI: [10.1007/978-3-030-11539-5_43](https://doi.org/10.1007/978-3-030-11539-5_43).
 12. Penenko A. V. Algorithms for the inverse modelling of transport and transformation of atmospheric pollutants // [IOP Conference Series: Earth and Environmental Science](#). 2018. Vol. 211. P. 012052–1–012052–8. DOI: [10.1088/1755-1315/211/1/012052](https://doi.org/10.1088/1755-1315/211/1/012052).
 13. Пененко А. В. Некоторые теоретические и прикладные вопросы последовательного вариационного усвоения данных // Вычислительные технологии. 2006. Т. 11, № Спец.выпуск ч.2. С. 35–40.
 14. Пененко А. В., Пененко В. В. Прямой метод вариационного усвоения данных для моделей конвекции-диффузии на основе схемы расщепления // Вычислительные технологии. 2014. Т. 19, № 4. С. 69–83.
 15. Penenko A., Penenko V., Nuterman R., Baklanov A., Mahura A. [Direct variational data assimilation algorithm for atmospheric chemistry data with transport and transformation model](#) // 21st International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics / Ed. by Oleg A. Romanovskii. Vol. 968076 of Proc. of SPIE. SPIE-Intl Soc Optical Eng, 2015. P. 968076–1–968076–12. DOI: [10.1117/12.2206008](https://doi.org/10.1117/12.2206008).
 16. Penenko A., Antokhin P. Numerical study of variational data assimilation algorithms based on decomposition methods in atmospheric chemistry models // [IOP Conference Series: Earth and Environmental Science](#). 2016. Vol. 48. P. 012021–1–012021–10. DOI: [10.1088/1755-1315/48/1/012021](https://doi.org/10.1088/1755-1315/48/1/012021).
 17. Пененко А. В., Пененко В. В., Цветова Е. А. Последовательные алгоритмы усвоения данных в моделях мониторинга качества атмосферы на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями // [Сибирский журнал вычислительной математики](#). 2016. Т. 19, № 4. С. 401–418. DOI: [10.15372/SJNM20160405](https://doi.org/10.15372/SJNM20160405).
 18. Пененко В. В., Пененко А. В., Цветова Е. А. Вариационный подход к исследованию процессов геофизической гидротермодинамики с усвоением дан-

- ных наблюдений // Прикладная механика и техническая физика. 2017. Т. 58, № 5. С. 17–25. DOI: [10.15372/pmtf20170502](https://doi.org/10.15372/pmtf20170502).
19. Пененко А. В., Мукатова Ж. С., Пененко В. В., Гочаков А. В., Антохин П. Н. Численное исследование прямого вариационного алгоритма усвоения данных в городских условиях // Оптика атмосферы и океана. 2018. Т. 31, № 6. С. 456–462. DOI: [10.15372/A0020180606](https://doi.org/10.15372/A0020180606).
20. Антохин П. Н., Пененко А. В., Антохина О. Ю. Алгоритм восстановления вертикального распределения мощностей источников и стоков субстанции в пограничном слое атмосферы // Оптика атмосферы и океана. 2018. Т. 31, № 1. С. 49–56. DOI: [10.15372/A0020180108](https://doi.org/10.15372/A0020180108).
21. Penenko A., Penenko V., Tsvetova E., Grishina A., Antokhin P. [Sequential variational data assimilation algorithms at the splitting stages of a numerical atmospheric chemistry model](#) // Large-Scale Scientific Computing. Springer International Publishing, 2018. Vol. 10665 of Lecture Notes in Computer Science. P. 536–543. DOI: [10.1007/978-3-319-73441-5_59](https://doi.org/10.1007/978-3-319-73441-5_59).
22. Penenko A., Mukatova Z., Konopleva V. [Scenario approach for the optimization of regularization parameters in the direct variational data assimilation algorithm](#) // 2019 15th International Asian School-Seminar Optimization Problems of Complex Systems (OPCS). IEEE, 2019. P. 131–134. DOI: [10.1109/opcs.2019.8880181](https://doi.org/10.1109/opcs.2019.8880181).
23. Penenko A., Gochakov A. Parallel speedup analysis of an adjoint ensemble-based source identification algorithm // [Journal of Physics: Conference Series](#). 2021. Vol. 1715. P. 012072–1–012072–6. DOI: [10.1088/1742-6596/1715/1/012072](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1715/1/012072).

II. Государственная регистрация программы для ЭВМ:

24. Пененко А. В. Программа для идентификации источников в нестационарных моделях адвекции-диффузии-реакции на основе операторов чувствительности по данным измерений типа изображений функции состояния модели. 2020. Свидетельство о государственной регистрации № 2020660310 от 01.09.2020.