

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ АЛГОРИТМОВ ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ МЕТОДОВ ДЕКОМПОЗИЦИИ В МОДЕЛЯХ АТМОСФЕРНОЙ ХИМИИ

А.В. Пененко и П.Н. Антохин
a.penenko@yandex.ru

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
Новосибирский государственный университет
Институт оптики атмосферы им. В.Е.Зуева СО РАН

Enviromis 2016, Томск



Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP
- 8 Заключение
- 9 Литература



Актуальность прогнозирования химической погоды

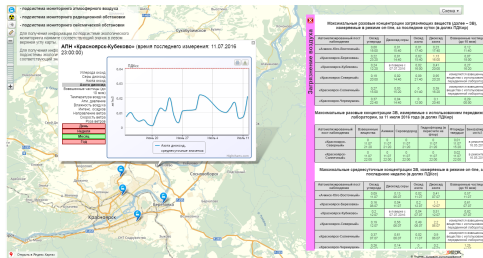


Рис. 1: Слева: панорама Красноярска, справа: сайт системы мониторинга <http://www.krasecology.ru/Operative/Air>.

- Качество атмосферного воздуха (газовый и аэрозольный состав) влияет на здоровье жителей современных городов.
- Точные и своевременные прогнозы химической погоды важны для принятия решений от личного до муниципального уровней.



Актуальность прогнозирования химической погоды

- Загрязнение атмосферы происходит за счет работы промышленных предприятий и транспорта, в результате различных чрезвычайных ситуаций.



Актуальность прогнозирования химической погоды

- Загрязнение атмосферы происходит за счет работы промышленных предприятий и транспорта, в результате различных чрезвычайных ситуаций.
- Выбрасываемые относительно "нейтральные" химические вещества могут трансформироваться во вредные соединения.



Актуальность прогнозирования химической погоды

- Загрязнение атмосферы происходит за счет работы промышленных предприятий и транспорта, в результате различных чрезвычайных ситуаций.
- Выбрасываемые относительно "нейтральные" химические вещества могут трансформироваться во вредные соединения.
- На основе прогноза химической погоды городские власти могут принимать решения по своевременному ограничению транспорта и промышленных выбросов. Пример Шанхая (уровни опасности):



Актуальность прогнозирования химической погоды

- Загрязнение атмосферы происходит за счет работы промышленных предприятий и транспорта, в результате различных чрезвычайных ситуаций.
- Выбрасываемые относительно "нейтральные" химические вещества могут трансформироваться во вредные соединения.
- На основе прогноза химической погоды городские власти могут принимать решения по своевременному ограничению транспорта и промышленных выбросов. Пример Шанхая (уровни опасности):
 - Голубой: предупреждения промышленности и транспорту.



Актуальность прогнозирования химической погоды

- Загрязнение атмосферы происходит за счет работы промышленных предприятий и транспорта, в результате различных чрезвычайных ситуаций.
- Выбрасываемые относительно "нейтральные" химические вещества могут трансформироваться во вредные соединения.
- На основе прогноза химической погоды городские власти могут принимать решения по своевременному ограничению транспорта и промышленных выбросов. Пример Шанхая (уровни опасности):
 - Голубой: предупреждения промышленности и транспорту.
 - Желтый: приостановка деятельности мелких промышленных предприятий, ограничения на проезд транспорта.



Актуальность прогнозирования химической погоды

- Загрязнение атмосферы происходит за счет работы промышленных предприятий и транспорта, в результате различных чрезвычайных ситуаций.
- Выбрасываемые относительно "нейтральные" химические вещества могут трансформироваться во вредные соединения.
- На основе прогноза химической погоды городские власти могут принимать решения по своевременному ограничению транспорта и промышленных выбросов. Пример Шанхая (уровни опасности):
 - Голубой: предупреждения промышленности и транспорту.
 - Желтый: приостановка деятельности мелких промышленных предприятий, ограничения на проезд транспорта.
 - Оранжевый: приостановка деятельности нефтяных, химических, металлургических, цементных заводов.



Актуальность прогнозирования химической погоды

- Загрязнение атмосферы происходит за счет работы промышленных предприятий и транспорта, в результате различных чрезвычайных ситуаций.
- Выбрасываемые относительно "нейтральные" химические вещества могут трансформироваться во вредные соединения.
- На основе прогноза химической погоды городские власти могут принимать решения по своевременному ограничению транспорта и промышленных выбросов. Пример Шанхая (уровни опасности):
 - Голубой: предупреждения промышленности и транспорту.
 - Желтый: приостановка деятельности мелких промышленных предприятий, ограничения на проезд транспорта.
 - Оранжевый: приостановка деятельности нефтяных, химических, металлургических, цементных заводов.
 - Красный: не работают детские сады и средние школы, половина гос. транспорта не выходит на дороги, отменяются общественные мероприятия, стройки останавливаются.



Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP
- 8 Заключение
- 9 Литература



Классы задач обратного моделирования

- **Прямые задачи:** Требуется смоделировать и исследовать распределение концентраций химических веществ при заданных параметрах моделей.



Классы задач обратного моделирования

- **Прямые задачи:** Требуется смоделировать и исследовать распределение концентраций химических веществ при заданных параметрах моделей.
- **Задачи управления:** Требуется уточнить параметры моделей, чтобы приблизить модельные расчеты к данным измерений.
Требует решения последовательности прямых задач с различными параметрами моделей.



Классы задач обратного моделирования

- **Прямые задачи:** Требуется смоделировать и исследовать распределение концентраций химических веществ при заданных параметрах моделей.
- **Задачи управления:** Требуется уточнить параметры моделей, чтобы приблизить модельные расчеты к данным измерений.
Требуется решения последовательности прямых задач с различными параметрами моделей.
- **Обратные задачи:** Требуется найти неизвестную функцию состояния или неизвестные параметры по дополнительной информации. Может потребовать решения последовательности задач управления.



Классы задач обратного моделирования

- **Прямые задачи:** Требуется смоделировать и исследовать распределение концентраций химических веществ при заданных параметрах моделей.
- **Задачи управления:** Требуется уточнить параметры моделей, чтобы приблизить модельные расчеты к данным измерений.
Требуется решения последовательности прямых задач с различными параметрами моделей.
- **Обратные задачи:** Требуется найти неизвестную функцию состояния или неизвестные параметры по дополнительной информации.
Может потребовать решения последовательности задач управления.
- **Задачи усвоения данных:** Требуется строить прогноз химической погоды в реальном времени, уточняя параметры модели на основе поступающих данных измерений.
Требуется решения последовательности связанных обратных задач с различными наборами данными измерений.



Прямые задачи динамики аэрозолей

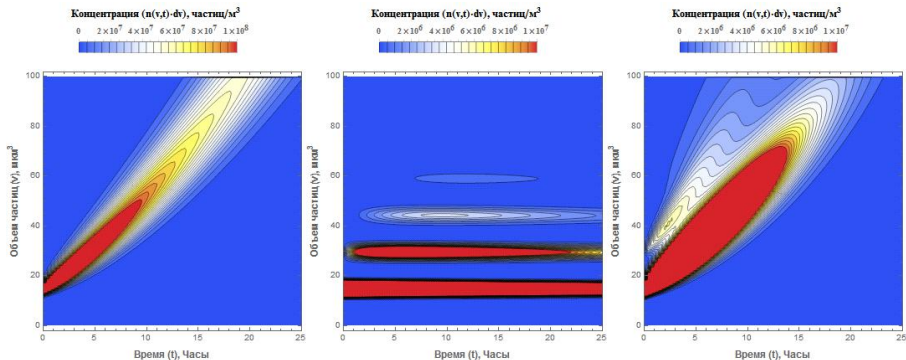


Рис. 2: Пример расчетов динамики биоаэрозолей для различных наборов учитываемых процессов
[Пененко, Сороковой, Сороковая, Оптика атм. и океана, 2016]

Поиск высоты формирования озона

В предположении горизонтальной однородности полей концентраций:

$$(z, t) \in \Omega_T := [0, Z] \times [0, T] \in R^2.$$

Модель процессов:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + w \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} + f, \quad (z, t) \in \Omega_T. \quad (1)$$

$$-\mu \frac{\partial \phi}{\partial z} + \beta_L \phi = \alpha_L, \quad z = 0, \quad t \in [0, T], \quad (2)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial z} + \beta_R \phi = \alpha_R, \quad z = Z, \quad t \in [0, T], \quad (3)$$

$$\phi(z, 0) = \phi^0(z), \quad z \in [0, Z], \quad (4)$$

Данные измерений:

$$\phi(z, t_m) = I_m(z), \quad z \in [0, Z], \quad t_0 = 0, \quad t_m \in [0, T], \quad m = 1, \dots, M-1.$$

Найти f .



Поиск высоты формирования озона

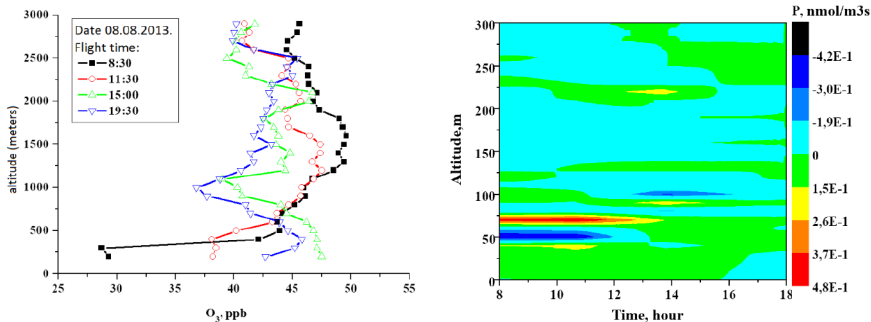


Рис. 3: Поиск источников озона. Слева профили концентрации. Справа - восстановленные источники (минимизация методом сопряженных градиентов функционала невязки со стабилизатором, увеличивающим гладкость решений по времени).



Задача усвоения данных

- Многомерные модели процессов транспорта и трансформации тепла, влаги, радиации и примесей:

$$\frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{\phi} \vec{u} - \mu \operatorname{grad} \vec{\phi}) = S(\vec{\phi}) + \vec{f}_a + \vec{r}, \quad \{\vec{x}, t\} \in D \times [0, T],$$

$$\vec{\phi}|_{t=0} = \vec{\phi}_a, \quad \vec{x} \in D; \quad \mu \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial \vec{n}} + \beta \vec{\phi} = \vec{g}_a, \quad \{\vec{x}, t\} \in \partial D \times [0, T].$$

- Данные измерений связаны с функцией состояния оператором наблюдений **H**

$$\vec{\Psi} = \mathbf{H}(\vec{\phi}) + \vec{\eta},$$

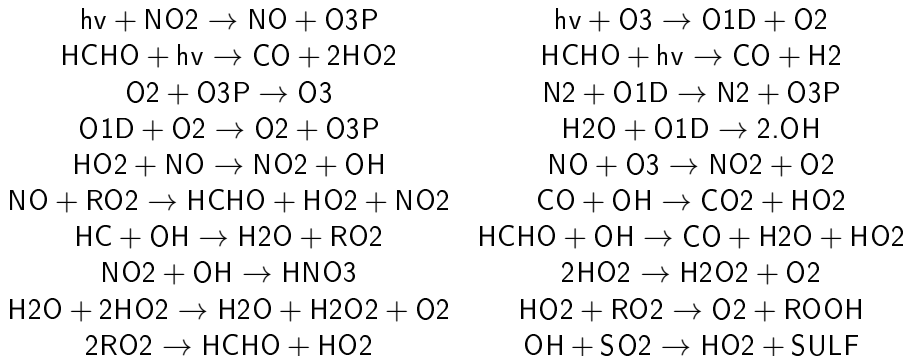
$\vec{\phi}$ - функция состояния модели, $\{\vec{u}, \mu\} = \vec{Y}$ - параметры модели, S - оператор трансформации, $\vec{f}_a, \vec{g}_a, \vec{\phi}_a^0$ - априорные значения источников, $\vec{\Psi}$ - данные наблюдений, $\vec{r}, \vec{\eta}$ - функции управления из заданных множеств, которые вводятся для усвоения данных

- Найти ϕ при $t \geq t^*$ по данным измерений при $t \leq t^*$.



Модель трансформации (газовый состав)

Рассмотрим модель химии (газовой фазы) атмосферы содержащую 23 вещества в 20 уравнениях реакции:



Сценарий подготовлен совместно Р.Нутреманом и А.Махурой
 [Penenko, Penenko, Nuterman 2014] основе [Gery, 1989],
 [Stockwell, Goliff, 2002], [Nuterman et.al 2011]



Модель химии атмосферы

$$CO'(t) = HCHO(t) k_3 + HCHO(t) k_4 - CO(t) OH(t) k_{12} + HCHO(t) OH(t) k_{14}$$

$$CO_2'(t) = CO(t) OH(t) k_{12}$$

$$H_2'(t) = HCHO(t) k_4$$

$$H_2O'(t) = -H_2O(t) O_1D(t) k_8 + HC(t) OH(t) k_{13} + HCHO(t) OH(t) k_{14}$$

$$H_2O_2'(t) = k_{16} HO_2(t)^2 + H_2O(t) k_{17} HO_2(t)^2$$

$$HC'(t) = -HC(t) OH(t) k_{13}$$

$$HCHO'(t) = k_{19} RO_2(t)^2 + NO(t) k_{11} RO_2(t) - HCHO(t) k_3 - HCHO(t) k_4 - HCHO(t) OH(t) k_{14}$$

$$HNO_3'(t) = NO_2(t) OH(t) k_{15}$$

$$HO_2'(t) = -2 \cdot k_{16} HO_2(t)^2 - 2 \cdot H_2O(t) k_{17} HO_2(t)^2 - NO(t) k_9 HO_2(t) - RO_2(t) k_{18} HO_2(t) + 2 \cdot HCHO(t) k_3 + NO(t) RO_2(t) k_{11} + CO(t) OH(t) k_{12} + HCHO(t) OH(t) k_{14} + RO_2(t)^2 \cdot k_{19} + OH(t) SO_2(t) k_{20}$$

$$N_2'(t) = 0$$

$$NO'(t) = NO_2(t) k_1 - HO_2(t) NO(t) k_9 - NO(t) O_3(t) k_{10} - NO(t) RO_2(t) k_{11}$$

$$NO_2'(t) = -NO_2(t) k_1 + HO_2(t) NO(t) k_9 + NO(t) O_3(t) k_{10} + NO(t) RO_2(t) k_{11} - NO_2(t) OH(t) k_{15}$$

$$O_1D'(t) = O_3(t) k_2 - N_2(t) O_1D(t) k_6 - O_1D(t) O_2(t) k_7 - H_2O(t) O_1D(t) k_8$$

$$O_2'(t) = k_{16} HO_2(t)^2 + H_2O(t) k_{17} HO_2(t)^2 + RO_2(t) k_{18} HO_2(t) + O_3(t) k_2 - O_2(t) O_3P(t) k_5 + NO(t) O_3(t) k_{10}$$

$$O_3'(t) = -O_3(t) k_2 + O_2(t) O_3P(t) k_5 - NO(t) O_3(t) k_{10}$$

$$O_3P'(t) = NO_2(t) k_1 - O_2(t) O_3P(t) k_5 + N_2(t) O_1D(t) k_6 + O_1D(t) O_2(t) k_7$$

$$OH'(t) = 2 \cdot H_2O(t) O_1D(t) k_8 + HO_2(t) NO(t) k_9 - CO(t) OH(t) k_{12} - HC(t) OH(t) k_{13} - HCHO(t) OH(t) k_{14} - NO_2(t) OH(t) k_{15} - OH(t) SO_2(t) k_{20}$$

$$RO_2'(t) = -2 \cdot k_{19} RO_2(t)^2 - NO(t) k_{11} RO_2(t) - HO_2(t) k_{18} RO_2(t) + HC(t) OH(t) k_{13}$$

$$ROOH'(t) = HO_2(t) RO_2(t) k_{18}$$

$$SO_2'(t) = -OH(t) SO_2(t) k_{20}$$

$$SULF'(t) = OH(t) SO_2(t) k_{20}$$



Расчет концентраций

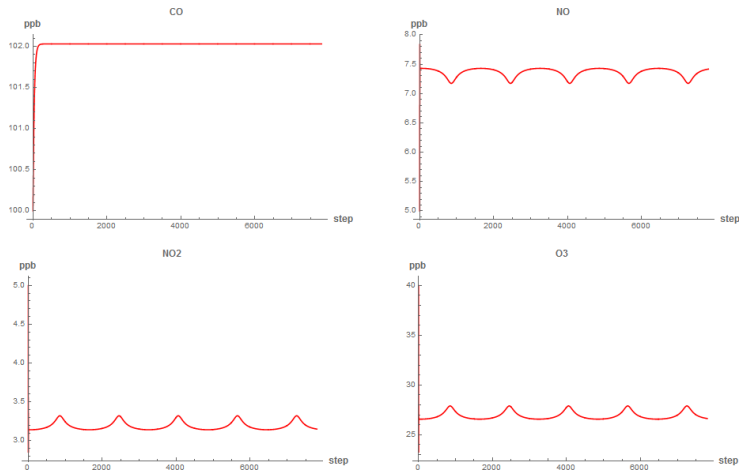


Рис. 4: Динамика концентраций

Моделирование химической кинетики

- Рассмотрим пример

$$\begin{aligned} \text{HCHO}'(t) + \text{HCHO}(t) (k_{14}\text{OH}(t) + k_3 + k_4) = \\ = k_{11}\text{NO}(t)\text{RO}_2(t) + k_{19}\text{RO}_2(t)^2. \end{aligned}$$



Моделирование химической кинетики

- Рассмотрим пример

$$\begin{aligned} \text{HCHO}'(t) + \text{HCHO}(t) (k_{14}\text{OH}(t) + k_3 + k_4) = \\ = k_{11}\text{NO}(t)\text{RO}_2(t) + k_{19}\text{RO}_2(t)^2. \end{aligned}$$

- Уравнения имеют следующую структуру

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + P(\phi)\phi = \Pi(\phi), \quad P(\phi) \geq 0, \Pi(\phi) \geq 0, \phi \geq 0.$$

где ϕ - концентрация вещества, $P(\phi)$ - функционал деструкции и $\Pi(\phi)$ - функционал продукции.



Моделирование химической кинетики

- Рассмотрим пример

$$\text{HCHO}'(t) + \text{HCHO}(t) (k_{14}\text{OH}(t) + k_3 + k_4) = \\ = k_{11}\text{NO}(t)\text{RO}_2(t) + k_{19}\text{RO}_2(t)^2.$$

- Уравнения имеют следующую структуру

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + P(\phi)\phi = \Pi(\phi), \quad P(\phi) \geq 0, \Pi(\phi) \geq 0, \phi \geq 0.$$

где ϕ - концентрация вещества, $P(\phi)$ - функционал деструкции и $\Pi(\phi)$ - функционал продукции.

- Метод построения дискретно - аналитических схем [Penenko V., Tsvetova E., 2013], в простейшем случае дает алгоритм QSSA [Hesstvedt et al, 1978] (экспоненциальный Рунге-Кутты):

$$\phi^{j+1} = \phi^j e^{-P(\phi^j)\Delta t} + \frac{1 - e^{-P(\phi^j)\Delta t}}{P(\phi^j)\Delta t} \Pi(\phi^j)\Delta t, \quad j = 1, \dots, Nt$$



Сложность прогнозирования химической погоды

- Интерес представляет текущее (и будущие) состояния системы в "реальном времени".



Сложность прогнозирования химической погоды

- Интерес представляет текущее (и будущее) состояния системы в "реальном времени".
- Различные временные масштабы процессов, разнообразие химических механизмов и их нелинейный характер требуют специальных численных методов.



Сложность прогнозирования химической погоды

- Интерес представляет текущее (и будущие) состояния системы в "реальном времени".
- Различные временные масштабы процессов, разнообразие химических механизмов и их нелинейный характер требуют специальных численных методов.
- Высокая размерность ($\approx 10^7$) современных моделей атмосферной химии (пространственные переменные и различные вещества).



Сложность прогнозирования химической погоды

- Интерес представляет текущее (и будущее) состояния системы в "реальном времени".
- Различные временные масштабы процессов, разнообразие химических механизмов и их нелинейный характер требуют специальных численных методов.
- Высокая размерность ($\approx 10^7$) современных моделей атмосферной химии (пространственные переменные и различные вещества).
- Измерению в относительно малом числе пространственных точек доступно относительно небольшое количество химических веществ (единицы), а влияние на химическую погоду могут оказывать десятки и сотни.



Сложность прогнозирования химической погоды

- Интерес представляет текущее (и будущее) состояния системы в "реальном времени".
- Различные временные масштабы процессов, разнообразие химических механизмов и их нелинейный характер требуют специальных численных методов.
- Высокая размерность ($\approx 10^7$) современных моделей атмосферной химии (пространственные переменные и различные вещества).
- Измерению в относительно малом числе пространственных точек доступно относительно небольшое количество химических веществ (единицы), а влияние на химическую погоду могут оказывать десятки и сотни.
- Неопределёнными являются начальные распределения концентраций, метеорологические условия, скорости химических реакций, а также источники примесей.



Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных**
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP
- 8 Заключение
- 9 Литература



Схема последовательного усвоения данных

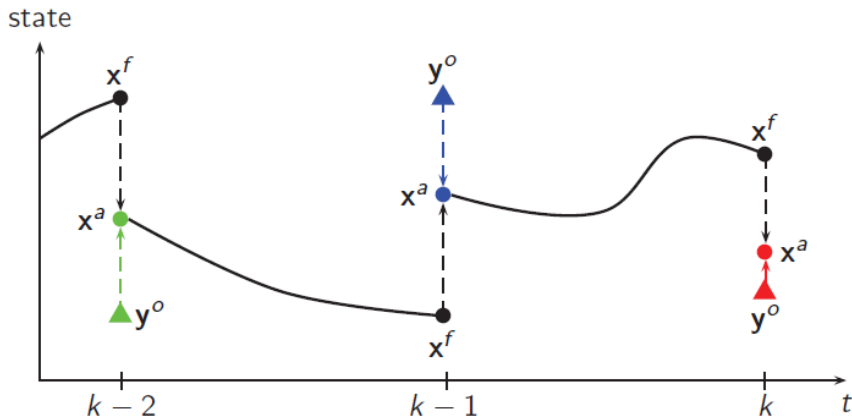


Рис. 5: Общая схема последовательного усвоения данных (3DVAR, фильтр Калмана, рассматриваемый алгоритм), картинка из [Auroux2011]



Схема с окном усвоения

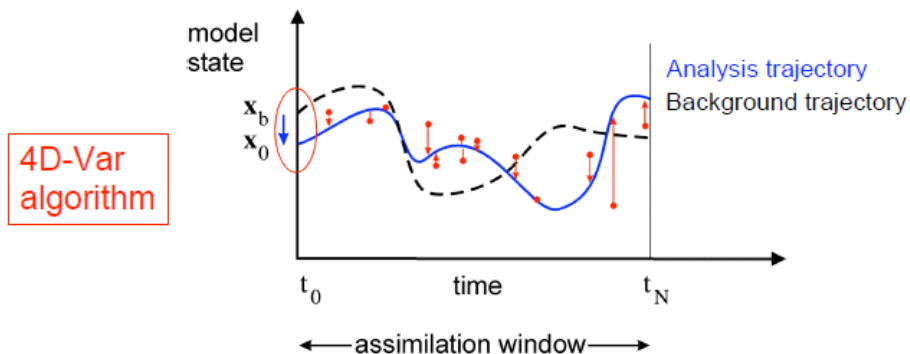


Рис. 6: Общая схема с окном усвоения (4DVAR)

Основные подходы к усвоению данных

- Обзоры [Sandu, Tianfeng, 2011], [Baklanov et. al., 2014], [Bocquet et. al., 2014]

Основные подходы к усвоению данных

- Обзоры [Sandu, Tianfeng, 2011], [Baklanov et. al., 2014], [Bocquet et. al., 2014]
- Вариационные (решение задачи усвоения разыскивается как минимум некоторого целевого функционала) [V.Penenko, Obraztsov, 1976], [LeDimet, Talagrand, 1986], [Talagrand, Courtier, 1987] и др.



Основные подходы к усвоению данных

- Обзоры [Sandu, Tianfeng, 2011], [Baklanov et. al., 2014], [Bocquet et. al., 2014]
- Вариационные (решение задачи усвоения разыскивается как минимум некоторого целевого функционала)
[V.Penenko, Obraztsov, 1976], [LeDimet, Talagrand, 1986], [Talagrand, Courtier, 1987] и др.
 - 4DVAR в химии: [Fisher, Lary, 1995], [Elbern, Schmidt, 1999], [Fisher, Leutbecher, 2005], [Elbern, Strunk, Smidt, Talagrand, 2007]



Основные подходы к усвоению данных

- Обзоры [Sandu, Tianfeng, 2011], [Baklanov et. al., 2014], [Bocquet et. al., 2014]
- Вариационные (решение задачи усвоения разыскивается как минимум некоторого целевого функционала)
[V.Penenko, Obraztsov, 1976], [LeDimet, Talagrand, 1986], [Talagrand, Courtier, 1987] и др.
 - 4DVAR в химии: [Fisher, Lary, 1995], [Elbern, Schmidt, 1999], [Fisher, Leutbecher, 2005], [Elbern, Strunk, Smidt, Talagrand, 2007]
- Динамико-стохастический (оценка параметров статистических моделей).



Основные подходы к усвоению данных

- Обзоры [Sandu, Tianfeng, 2011], [Baklanov et. al., 2014], [Bocquet et. al., 2014]
- Вариационные (решение задачи усвоения разыскивается как минимум некоторого целевого функционала) [V.Penenko, Obraztsov, 1976], [LeDimet, Talagrand, 1986], [Talagrand, Courtier, 1987] и др.
 - 4DVAR в химии: [Fisher, Lary, 1995], [Elbern, Schmidt, 1999], [Fisher, Leutbecher, 2005], [Elbern, Strunk, Smidt, Talagrand, 2007]
- Динамико-стохастический (оценка параметров статистических моделей).
 - Фильтры типа Калмана (по данным измерений оцениваются параметры нормальных распределений) [Kalman, 1960].



Основные подходы к усвоению данных

- Обзоры [Sandu, Tianfeng, 2011], [Baklanov et. al., 2014], [Bocquet et. al., 2014]
- Вариационные (решение задачи усвоения разыскивается как минимум некоторого целевого функционала) [V.Penenko, Obraztsov, 1976], [LeDimet, Talagrand, 1986], [Talagrand, Courtier, 1987] и др.
 - 4DVAR в химии: [Fisher, Lary, 1995], [Elbern, Schmidt, 1999], [Fisher, Leutbecher, 2005], [Elbern, Strunk, Smidt, Talagrand, 2007]
- Динамико-стохастический (оценка параметров статистических моделей).
 - Фильтры типа Калмана (по данным измерений оцениваются параметры нормальных распределений) [Kalman, 1960].
 - Фильтры частиц (по данным измерений взвешиваются элементы ансамбля решений). [vanLeeuwen, 2009], [Bocquet, 2010]



Основные подходы к усвоению данных

- Обзоры [Sandu, Tianfeng, 2011], [Baklanov et. al., 2014], [Bocquet et. al., 2014]
- Вариационные (решение задачи усвоения разыскивается как минимум некоторого целевого функционала) [V.Penenko, Obraztsov, 1976], [LeDimet, Talagrand, 1986], [Talagrand, Courtier, 1987] и др.
 - 4DVAR в химии: [Fisher, Lary, 1995], [Elbern, Schmidt, 1999], [Fisher, Leutbecher, 2005], [Elbern, Strunk, Smidt, Talagrand, 2007]
- Динамико-стохастический (оценка параметров статистических моделей).
 - Фильтры типа Калмана (по данным измерений оцениваются параметры нормальных распределений) [Kalman, 1960].
 - Фильтры частиц (по данным измерений взвешиваются элементы ансамбля решений). [vanLeeuwen, 2009], [Bocquet, 2010]
- Гибридные подходы EnVar и т.д. [Lorenc, 2003]



Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных**
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP
- 8 Заключение
- 9 Литература



Схема усвоения со слабыми ограничениями

- Рассмотрим следующую задачу условной оптимизации

$$J^j(\phi^j, r^j) = \|H\phi^j - \Psi^j\|^2 + \alpha \|r^j\|^2.$$

относительно ограничения - **неявной** **схемы** **аппроксимации**
модели

$$L\phi^j = \phi^{j-1} + \tau f^j + \tau r^j.$$

Схема усвоения со слабыми ограничениями

- Рассмотрим следующую задачу условной оптимизации

$$J(\phi^j, r^j) = \|H\phi^j - \Psi^j\|^2 + \alpha \|r^j\|^2.$$

относительно ограничения - **неявной схемы аппроксимации модели**

$$L\phi^j = \phi^{j-1} + \tau f^j + \tau r^j.$$

- Вводя множители Лагранжа ϕ^{j*} получим расширенный функционал

$$J(\phi^j, r^j, \phi^{j*}) = \|H\phi^j - \Psi^j\|^2 + \alpha \|r^j\|^2 + \left\langle L\phi^j - (\phi^{j-1} + \tau f^j + \tau r^j), \phi^{j*} \right\rangle.$$

Схема усвоения со слабыми ограничениями

- Рассмотрим следующую задачу условной оптимизации

$$J(\phi^j, r^j) = \|H\phi^j - \Psi^j\|^2 + \alpha \|r^j\|^2.$$

относительно ограничения - **неявной схемы аппроксимации модели**

$$L\phi^j = \phi^{j-1} + \tau f^j + \tau r^j.$$

- Вводя множители Лагранжа ϕ^{j*} получим расширенный функционал

$$J(\phi^j, r^j, \phi^{j*}) = \|H\phi^j - \Psi^j\|^2 + \alpha \|r^j\|^2 + \langle L\phi^j - (\phi^{j-1} + \tau f^j + \tau r^j), \phi^{j*} \rangle.$$

- Стационарная точка которого удовлетворяет системе

$$\begin{pmatrix} L & -\frac{1}{2\alpha} \\ 2H^*H & L^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^j \\ \phi^{j*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi^{j-1} + \tau f^j \\ 2H^*\Psi \end{pmatrix}.$$



Схема усвоения со слабыми ограничениями

- Алгоритм экономичен и действует на одном шаге по времени (аналогично 3DVAR) - без итераций внутри шага усвоения.



Схема усвоения со слабыми ограничениями

- Алгоритм экономичен и действует на одном шаге по времени (аналогично 3DVAR) - без итераций внутри шага усвоения.
- Благодаря управлению в источниках, решение обладает гладкостью, определяемой оператором шага прямой задачи (как в 4VAR).



Схема усвоения со слабыми ограничениями

- Алгоритм экономичен и действует на одном шаге по времени (аналогично 3DVAR) - без итераций внутри шага усвоения.
- Благодаря управлению в источниках, решение обладает гладкостью, определяемой оператором шага прямой задачи (как в 4VAR).
- Требуется решать систему прямой и сопряжённой задач (сгенерировать которую для "готовых" моделей может быть сложно), однако для одномерных уравнений конвекции-диффузии можно предложить прямой алгоритм решения задачи усвоения данных.



Схема усвоения со слабыми ограничениями

- Алгоритм экономичен и действует на одном шаге по времени (аналогично 3DVAR) - без итераций внутри шага усвоения.
- Благодаря управлению в источниках, решение обладает гладкостью, определяемой оператором шага прямой задачи (как в 4VAR).
- Требуется решать систему прямой и сопряжённой задач (сгенерировать которую для "готовых" моделей может быть сложно), однако для одномерных уравнений конвекции-диффузии можно предложить прямой алгоритм решения задачи усвоения данных.
- Более подробно про связь решения задачи усвоения с точным решением см. в [Пененко, Пененко, Цветова, СибЖВМ, 2016]



Аддитивно-усреднённая схема расщепления

- На временном интервале $t^{j-1} \leq t \leq t^j$ рассмотрим схему расщепления (аналогично [Самарский, Вабишевич, 2003]), для разбиений $\sum_{d=1}^2 \gamma_d + \gamma_c = 1$:



Аддитивно-усреднённая схема расщепления

- На временном интервале $t^{j-1} \leq t \leq t^j$ рассмотрим схему расщепления (аналогично [Самарский, Вабишевич, 2003]), для разбиений $\sum_{d=1}^2 \gamma_d + \gamma_c = 1$:
- Процессы транспорта

$$\gamma_d \frac{\partial \vec{\phi}_d}{\partial t} + L_d \vec{\phi}_d = \vec{f}_d + \vec{r}_d, \quad \{x, t\} \in [0, X_d] \times [t^{j-1}, t^j],$$

$$\vec{\phi}_d(t^{j-1}) = \vec{\phi}(t^{j-1}), \quad d = 1, 2.$$

Аддитивно-усреднённая схема расщепления

- На временном интервале $t^{j-1} \leq t \leq t^j$ рассмотрим схему расщепления (аналогично [Самарский, Вабишевич, 2003]), для разбиений $\sum_{d=1}^2 \gamma_d + \gamma_c = 1$:
- Процессы транспорта

$$\gamma_d \frac{\partial \vec{\phi}_d}{\partial t} + L_d \vec{\phi}_d = \vec{f}_d + \vec{r}_d, \quad \{x, t\} \in [0, X_d] \times [t^{j-1}, t^j],$$

$$\vec{\phi}_d(t^{j-1}) = \vec{\phi}(t^{j-1}), \quad d = 1, 2.$$

- Процессы трансформации

$$\gamma_c \frac{\partial \vec{\phi}_c}{\partial t} = S(\vec{\phi}_c), \quad t \in [t^{j-1}, t^j], \quad \vec{\phi}_c(t^{j-1}) = \vec{\phi}(t^{j-1}).$$

Аддитивно-усреднённая схема расщепления

- На временном интервале $t^{j-1} \leq t \leq t^j$ рассмотрим схему расщепления (аналогично [Самарский, Вабишевич, 2003]), для разбиений $\sum_{d=1}^2 \gamma_d + \gamma_c = 1$:
- Процессы транспорта

$$\gamma_d \frac{\partial \vec{\phi}_d}{\partial t} + L_d \vec{\phi}_d = \vec{f}_d + \vec{r}_d, \quad \{x, t\} \in [0, X_d] \times [t^{j-1}, t^j],$$

$$\vec{\phi}_d(t^{j-1}) = \vec{\phi}(t^{j-1}), \quad d = 1, 2.$$

- Процессы трансформации

$$\gamma_c \frac{\partial \vec{\phi}_c}{\partial t} = S(\vec{\phi}_c), \quad t \in [t^{j-1}, t^j], \quad \vec{\phi}_c(t^{j-1}) = \vec{\phi}(t^{j-1}).$$

- Аппроксимация следующего шага по времени

$$\vec{\phi}(t^j) = \sum_{d=1}^2 \gamma_d \vec{\phi}_d(t^j) + \gamma_c \vec{\phi}_c(t^j).$$



Схемы расщепления и усвоения

- Усвоение в расщепленную модель как целое [Пененко, 1981]

$$\left\{ \begin{array}{l} J(\vec{\phi}(t^j), \vec{r}^{j+1}) = \|H\vec{\phi}(t^j) - \Psi^j\|^2 + \alpha \|\vec{r}^{j+1}\|^2. \\ \gamma_d \frac{\partial \vec{\phi}_d}{\partial t} + L_d \vec{\phi}_d = \gamma_d \vec{f} + \gamma_d \vec{r}, \quad \vec{\phi}_d(t^j) = \vec{\phi}(t^j), \quad d = 1, 2. \\ \vec{\phi}(t^j) = \gamma_1 \vec{\phi}_1(t^j) + \gamma_2 \vec{\phi}_2(t^j). \end{array} \right.$$



Схемы расщепления и усвоения

- Усвоение в расщепленную модель как целое [Пененко, 1981]

$$\left\{ \begin{array}{l} J(\vec{\phi}(t^j), \vec{r}^{j+1}) = \|H\vec{\phi}(t^j) - \Psi^j\|^2 + \alpha \|\vec{r}^{j+1}\|^2. \\ \gamma_d \frac{\partial \vec{\phi}_d}{\partial t} + L_d \vec{\phi}_d = \gamma_d \vec{f} + \gamma_d \vec{r}, \quad \vec{\phi}_d(t^j) = \vec{\phi}(t^j), \quad d = 1, 2. \\ \vec{\phi}(t^j) = \gamma_1 \vec{\phi}_1(t^j) + \gamma_2 \vec{\phi}_2(t^j). \end{array} \right.$$

- Усвоение на отдельных шагах расщепления [V.Penenko, 2009], [Пененко, Пененко, 2014]

$$\left\{ \begin{array}{l} J_d(\vec{\phi}_d(t^{j+1}), \vec{r}_d^{j+1}) = \|H\vec{\phi}_d(t^{j+1}) - \Psi^{j+1}\|^2 + \alpha \|\vec{r}_d^{j+1}\|^2, \quad d = 1, 2. \\ \gamma_d \frac{\partial \vec{\phi}_d}{\partial t} + L_d \vec{\phi}_d = \gamma_d \vec{f} + \vec{r}_d, \quad \vec{\phi}_d(t^j) = \vec{\phi}(t^j) \\ \vec{\phi}(t^j) = \gamma_1 \vec{\phi}_1(t^j) + \gamma_2 \vec{\phi}_2(t^j). \end{array} \right.$$



Неявный алгоритм усвоения данных для одномерной модели конвекции-диффузии

Нестационарная одномерная модель конвекции-диффузии

$$\gamma_\alpha \frac{\partial \vec{\phi}_\alpha}{\partial t} + L_\alpha \vec{\phi}_\alpha = \vec{f}_\alpha + \vec{r}_\alpha, \quad \vec{\phi}_\alpha(t^j) = \vec{\phi}(t^j), \quad \alpha = 1, 2.$$

аппроксимируется на пространственно-временной сетке трехдиагональной системой.

$$\begin{aligned} -a_i \phi_{i+1}^{j+1} + b_i \phi_i^{j+1} &= \phi_i^j + \tau r_i^{j+1}, \quad i = 0, \\ -a_i \phi_{i+1}^{j+1} + b_i \phi_i^{j+1} - c_i \phi_{i-1}^{j+1} &= \phi_i^j + \tau r_i^{j+1}, \quad i = 1, \dots, N-2, \\ b_i \phi_i^{j+1} - c_i \phi_{i-1}^{j+1} &= \phi_i^j + \tau r_i^{j+1}, \quad i = N-1, \end{aligned}$$



Решение задачи усвоения данных

Пусть M_i^{j+1} равна 1 в точке измерения и 0 в остальных.

Решение задачи усвоения данных - минимум функционала

$$\Phi(\phi^{j+1}, r^{j+1}) = \left(\sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{\phi_i^{j+1} - \Psi_i^{j+1}}{\sigma_i} \right)^2 M_i^{j+1} + \alpha \sum_{i=1}^{N-1} (r_i^{j+1})^2 \right) \frac{\tau}{2},$$

относительно схемы для прямой задачи где σ_i - стандартные отклонения ошибок измерительного устройства.

Вводя множители Лагранжа (сопряженные функции) получим расширенный функционал:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(\phi^{j+1}, r^{j+1}, \phi^{*j+1}) = & \left(\sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{\phi_i^{j+1} - \Psi_i^{j+1}}{\sigma_i} \right)^2 M_i^{j+1} + \alpha \sum_{i=0}^{N-1} (r_i^{j+1})^2 \right) \frac{\tau}{2} \\ & + \sum_{i=0}^{N-1} \left(-a_i \phi_{i+1}^{j+1} + b_i \phi_i^{j+1} - c_i \phi_{i-1}^{j+1} - \phi_i^j - \tau r_i^{j+1} \right) \phi_i^{*j+1}. \end{aligned}$$



Матричная система

Систему прямой и сопряжённой задачи можно объединить в матричное уравнение [V.Penenko,2009], [Пененко,Пененко,2014]

$$\begin{aligned} -A_i\Phi_{i+1}^j + B_i\Phi_i^j &= F_i^j, \\ -A_i\Phi_{i+1}^j + B_i\Phi_i^j - C_i\Phi_{i-1}^j &= F_i^j, \\ B_i\Phi_i^j - C_i\Phi_{i-1}^j &= F_i^j, \end{aligned}$$

где

$$A_i = \begin{pmatrix} a_i & 0 \\ 0 & c_{i+1} \end{pmatrix}, \quad B_i = \begin{pmatrix} b_i & -\tau \\ \frac{M_i\tau}{\alpha\sigma_i^2} & b_i \end{pmatrix}, \quad C_i = \begin{pmatrix} c_i & 0 \\ 0 & a_{i-1} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_i^j = \begin{pmatrix} \phi_i^j \\ \phi_i^{*j} \end{pmatrix}, \quad F_i^j = \begin{pmatrix} \phi_i^{j-1} \\ \frac{M_i\tau}{\alpha\sigma_i^2} \Psi_i^j \end{pmatrix},$$

которое **решается методом матричной прогонки.**



Транспорт в двумерном случае

Описание сценария:

- 2D Область (30km x 30km).
- Вращающееся направление ветра.
- Данные берутся на регулярной сетке в пространстве и времени.
- "Реальный" источник в середине области.
- **Априорные источники нулевые.**



Сильно и слабо связанные схемы усвоения

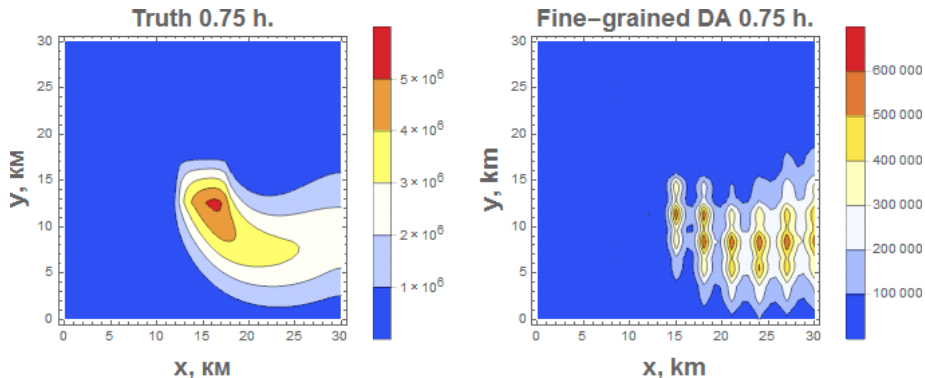


Рис. 7: Точное решение (слева) и результат усвоения (справа).

Усвоение и расщепление

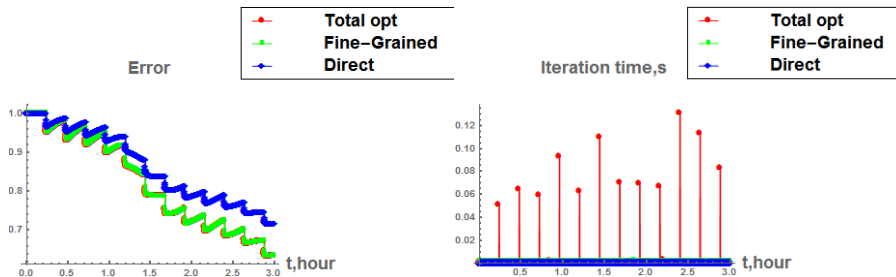


Рис. 8: Сравнение алгоритмов усвоения данных. Слева: ошибка восстановления, справа: время итерации.

Схема с усвоением на отдельных шагах расщепления дает систематическую ошибку при восстановлении источников на полных данных

Схема прямого усвоения химических данных

Стадия процессов трансформации описывается уравнениями

$$\frac{\partial \phi_I}{\partial t} + P_I(\bar{\phi})\phi_I = \Pi_I(\phi) + r_I, \quad P(\bar{\phi}) \geq 0, \Pi(\bar{\phi}) \geq 0, \bar{\phi} \geq 0,$$

где $P_I(\bar{\phi})$ - функционал деструкции и $\Pi_I(\bar{\phi})$ - функционал продукции.
QSSA схема [Hesstvedt et al, 1978]

$$\phi_I^j(r_I^j) = \phi_I^{j-1} e^{-P_I(\phi^{j-1})\tau} + \frac{1 - e^{-P_I(\phi^{j-1})\tau}}{P_I(\phi^{j-1})\tau} (\Pi_I(\phi^{j-1}) + r_I^j)\tau.$$

Результат усвоения данных разыскивается как минимум

$$\Phi(\bar{\phi}^j) = \sum_{l=1}^{N_c} (\phi_l^j - I_l^j)^2 M_l + \alpha \sum_{l=1}^{N_c} (r_l^j)^2,$$

где M_l равно 1 если l -ое вещество измеряется и 0 иначе:

$$\phi_l^j = \frac{1}{1 + Z_l} \phi_l^j(0) + \frac{Z_l}{1 + Z_l} I_l^j, \quad Z_l = \frac{M_l}{\alpha} \left(\frac{1 - e^{-P_l(\bar{\phi}^{j-1})\tau}}{P_l(\bar{\phi}^j)\tau} \right)^2.$$



Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей**
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP
- 8 Заключение
- 9 Литература



Усвоение данных вертикальных профилей

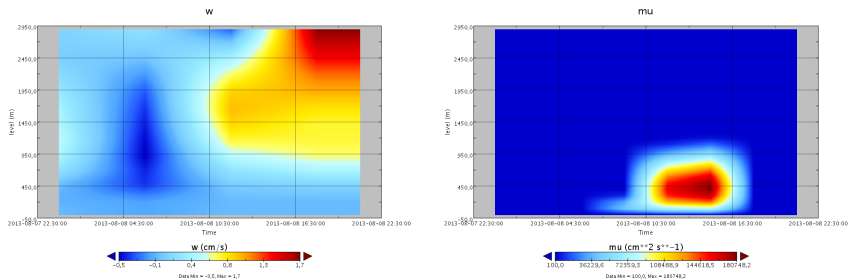


Рис. 9: Вертикальные скорость ветра и коэффициент диффузии,
 $\Delta t = 2861s$, $\Delta z = 500m$

Результаты

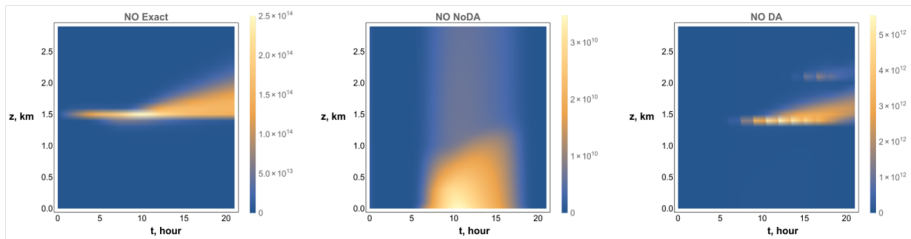


Рис. 10: Концентрация выбрасываемого вещества

Результаты

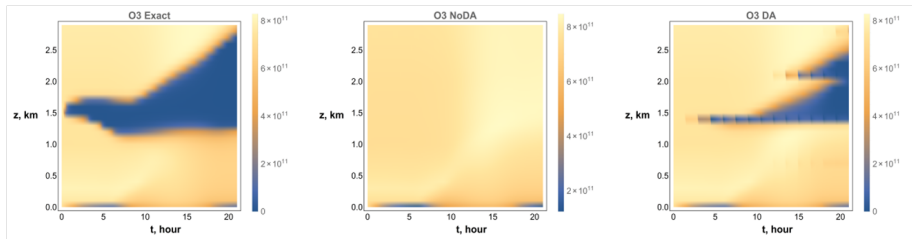


Рис. 11: Концентрация усваиваемого вещества

Результаты

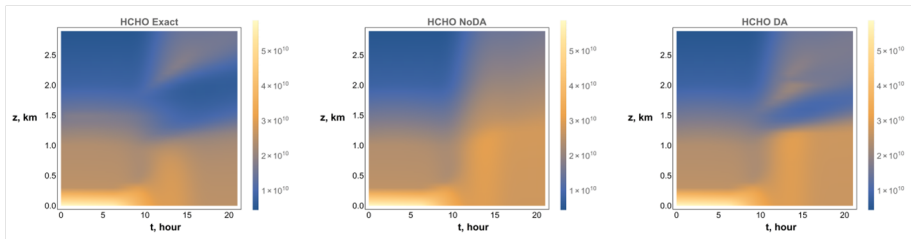


Рис. 12: Концентрация промежуточного вещества

Восстановление при различном уровне шума

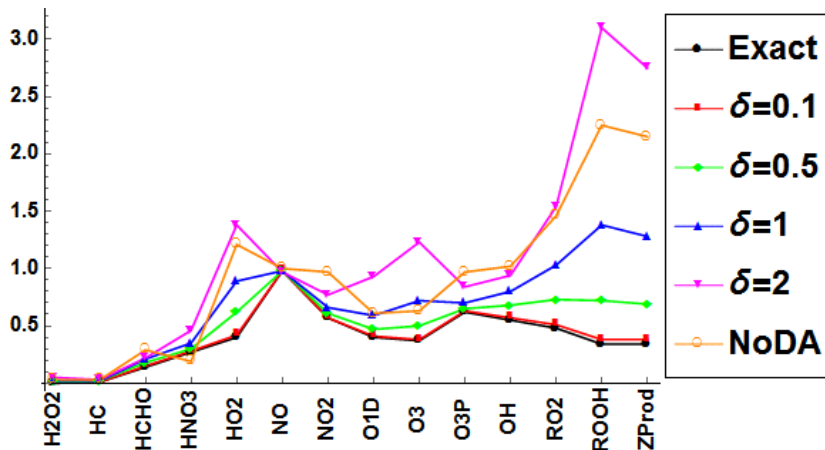


Рис. 13: Относительная ошибка восстановления при различном уровне шума

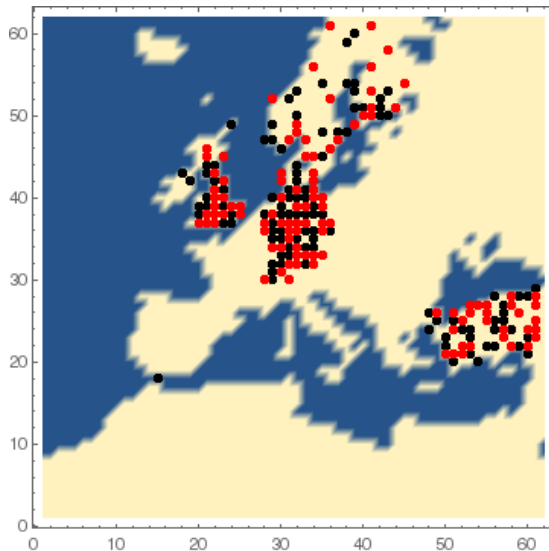


Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга**
- 7 MMGAP
- 8 Заключение
- 9 Литература



Область



Область

Сценарий подготовлен совместно Р.Нутреманом и А.Махурой
[Penenko, Penenko, Nuterman 2014]

- **Сеточная область:**

- Сетка по времени:

- Физический отрезок времени: 1 Июля 2010 - 1 Августа 2010.
 - Временная сетка для процессов транспорта

$$Lt = 3720(\text{grids}) * 720(s) = 31\text{day}$$

- Вложенная временная сетка для процессов трансформации в 100 раз реже:

$$Lt = 372000(\text{grids}) * 7.2(s) = 31\text{day}$$

- Пространственные сетки: (в 5 раз грубее чем сетки Enviro-HIRLAM):

$$Lx = 61(\text{grids}) * 83(\text{km}) = 5086\text{km},$$

$$Ly = 61(\text{grids}) * 81(\text{km}) = 4962\text{km}$$



Область

- **Параметры:**

- Основная неопределенность - источники выбросов неизвестны (заданы нулевые).
- Начальные данные из глобальной модели MOZART [Flemming, 2009]
- Скорости ветра на 10m (U10,V10) из модели Enviro-HIRLAM [Baklanov, 2008]

- **Данные измерений:**

- AirBase - the European Air quality database
- 198897 измерений SO_2, O_3, NO_2, CO, NO усваивается, и 197854 используется для сравнения.

- **Проверка алгоритмов:** Часть данных усваивается, часть используется для сравнения.



Влияние алгоритмов усвоения данных

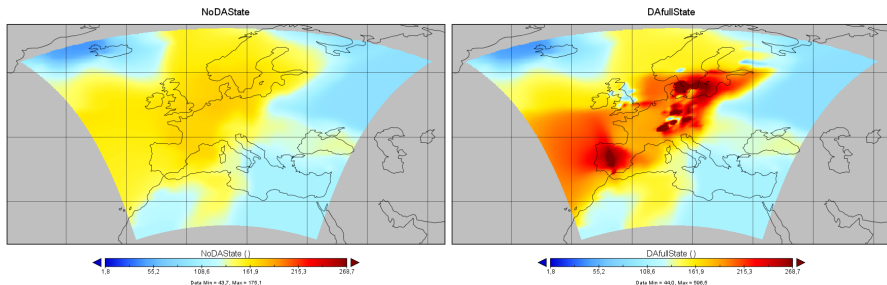


Рис. 14: Решение в некоторый момент времени. Слева - решение без усвоения. Справа - решение с усвоением.

Результат усвоения с искусственными данными

Вещество	TrspTrns	$\sigma = 0$	$\sigma = 0.3$	$\sigma = 0.7$
O_3	0.710335	0.944806	0.943968	0.941273
NO_2	0.517428	0.825647	0.824212	0.819671
NO	0.443524	0.82297	0.822155	0.819529
CO	0.258675	0.658969	0.662524	0.66599
SO_2	0.22953	0.809995	0.8083	0.804114

Таблица 1: Коэффициент корреляции решений и измерений по модели транспорта и трансформации с усвоением DATrspTrns при различных σ ; TrspTrns - конфигурация без усвоения.

Результат усвоения с реальными данными

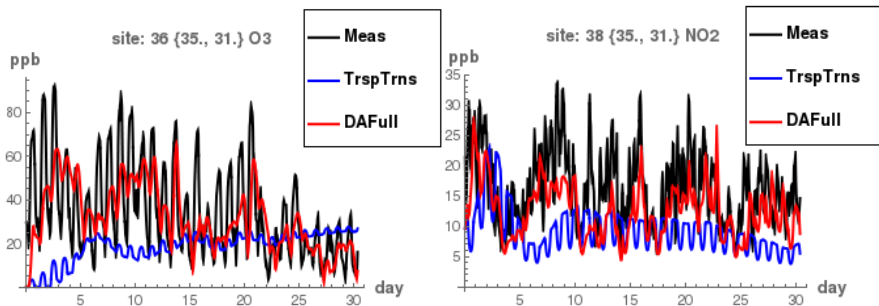


Рис. 15: Сравнение результатов решения задачи усвоения данных с реальными данными измерений Meas (черным) на определенной измерительной станции. прямая задача - TrspTrns (голубым); моделью с усвоением - DATrspTrns (красным).



Результат усвоения с реальными данными

Вещество	TrspTrns	DATrspTrns
O_3	-0.113619	0.489755
NO_2	0.0896602	0.211484
NO	0.0849778	0.220452
CO	0.0497666	0.017484
SO_2	-0.0104786	0.0733444

Таблица 2: Коэффициенты корреляции с реальными данными различных конфигураций: TrspTrns - транспорт и трансформация, DATrspTrns - транспорт и трансформация с усвоением.

Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP**
- 8 Заключение
- 9 Литература



Технические особенности реализации MMGA(ssim)P(latform)

- Назначение - решение задач обратного моделирования для моделей конвекции-диффузии-реакции.
- Пакет реализован на C++.
- Чтение конфигурационных файлов XML (возможность проведения численных экспериментов в пакетном режиме).
- Запись/чтение файлов данных в известном формате NetCDF (хорошие возможности визуализации).
- Распараллеливание OMP.



Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP
- 8 Заключение**
- 9 Литература



Заключение

- Высокая эффективность представленного алгоритма определяется:



Заклучение

- Высокая эффективность представленного алгоритма определяется:
 - Схеме усвоения данных со слабыми ограничениями и управлениями в источниках - физических смысл (гладкость) решения.



Заклучение

- Высокая эффективность представленного алгоритма определяется:
 - Схеме усвоения данных со слабыми ограничениями и управлениями в источниках - физических смысл (гладкость) решения.
 - Усвоении на отдельных стадиях расщепления по физическим процессам и пространственным измерениям - экономичный алгоритм.



Заклучение

- Высокая эффективность представленного алгоритма определяется:
 - Схеме усвоения данных со слабыми ограничениями и управлениями в источниках - физических смысл (гладкость) решения.
 - Усвоении на отдельных стадиях расщепления по физическим процессам и пространственным измерениям - экономичный алгоритм.
 - Прямых алгоритмах решения расщепленных задач усвоения данных - решения без итераций



Заклучение

- Высокая эффективность представленного алгоритма определяется:
 - Схеме усвоения данных со слабыми ограничениями и управлениями в источниках - физических смысл (гладкость) решения.
 - Усвоении на отдельных стадиях расщепления по физическим процессам и пространственным измерениям - экономичный алгоритм.
 - Прямых алгоритмах решения расщепленных задач усвоения данных - решения без итераций
- Алгоритм протестирован в реалистичных сценариях для усвоения данных вертикальных профилей и распределенной сети мониторинга.



Благодарю за внимание



Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН,
Новосибирский государственный университет
проводят

Восьмую Международную
молодежную научную школу-конференцию
**"Теория и численные методы решения
обратных и некорректных задач"**
Новосибирск, Академгородок, 1-7 сентября 2016 года



Сайт: <http://conf.ict.nsc.ru/tcmiip2016>

E-mail оргкомитета: tcmiip@vandex.ru

Председатели международного программного комитета:
чл.-корр. РАН С.И. Кабанихин, профессор А.Г. Ягола

Секции школы-конференции:

- методы регуляризации неустойчивых задач;
- обратные задачи математической физики;
- обратные и некорректные задачи биологии и медицины;
- обратные и некорректные задачи в науках о Земле;
- прямые и обратные задачи физики атмосферы, океана и охраны окружающей среды;
- высокопроизводительные вычисления в естественных науках.

Важные даты:

*17 июля 2016 – окончание регистрации участников и
приема тезисов докладов;*

*25 июля 2016 – рассылка извещений о приеме тезисов
и включении автора в число участников;*

20 августа 2016 – срок оплаты организационного взноса;

1-7 сентября 2016 – работа школы-конференции.



Схема доклада

- 1 Введение
- 2 Классы задач обратного моделирования
- 3 Методы решения задач усвоения данных
- 4 Построение алгоритма усвоения данных
 - Выбор схемы усвоения данных
 - Усвоение для одномерной модели конвекции-диффузии
 - Схема расщепления
- 5 Усвоение данных вертикальных профилей
- 6 Усвоение данных распределенной сети мониторинга
- 7 MMGAP
- 8 Заключение
- 9 Литература



Список литературы I



Baklanov A. et. al. Online coupled regional meteorology chemistry models in Europe: current status and prospects // Atmos. Chem. Phys. 2014, Vol. 14, P. 317–398.



A. Sandu and C. Tianfeng.
Chemical data assimilation - an overview.
Atmosphere, 2:426–463, 2011.



M. Bocquet et. al. Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmos. Chem. Phys. Discuss., 14, 32233–32323, 2014
www.atmos-chem-phys-discuss.net/14/32233/2014/
[doi:10.5194/acpd-14-32233-2014](https://doi.org/10.5194/acpd-14-32233-2014)



Список литературы II

-  V. V. Penenko *Variational methods of data assimilation and inverse problems for studying the atmosphere, ocean, and environment* Num. Anal. and Appl., 2009 V 2 No 4, 341-351.
-  Fisher, M. and Lary, D. J.: Lagrangian four-dimensional variational data assimilation of chemical species, Q. J. Roy. Meteor. Soc., 121, 1681–1704, 1995.
-  Elbern, H. and Schmidt, H.: A four-dimensional variational chemistry data assimilation scheme for Eulerian chemistry transport modeling, J. Geophys. Res., 104, 18583–18598, 1999.
-  Fisher, M., Leutbecher, M., and Kelly, G. A.: On the equivalence between Kalman smoothing and weak-constraint four-dimensional variational data assimilation, Q. J. Roy. Meteor. Soc., 131, 3235–3246, 2005.



Список литературы III



Penenko, A., Penenko, V., Nuterman, R., Mahura, A.
Discrete-Analytical Algorithms for Atmospheric Transport and
Chemistry Simulation and Chemical Data Assimilation. DMI Scientific
Report 14-02 (2014) www.dmi.dk/dmi/sr14-02.pdf



Penenko A., Penenko V., Nuterman R., et al. Direct variational data
assimilation algorithm for atmospheric chemistry data with transport
and transformation model //Proc. SPIE 9680, 21st International
Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics,
968076 (November 19, 2015); doi:10.1117/12.2206008



Baklanov A., U. Korsholm, A. Mahura, C. Petersen, A. Gross, 2008:
Enviro-HIRLAM: on-line coupled modelling of urban meteorology and
air pollution. Adv. Sci. Res., 2, 41-46



Список литературы IV

-  Flemming, J., A., Inness, H., Flentje, V., Huijnen, P., Moinat, M. G., Schultz, and Stein, O.: Coupling global chemistry transport models to ECMWF's integrated forecast system, *Geosci. Model Dev.*, 2, 253–265, doi:10.5194/gmd-2-253-2009, 2009.
-  AirBase - The European air quality database.
<http://www.eea.europa.eu/data-and-maps>
-  Lorenc, A. C.: The potential of the ensemble Kalman filter for NWP – a comparison with 4DVar, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 129, 3183–3203, 2003:
-  Lorenc, A. C.: The potential of the ensemble Kalman filter for NWP – a comparison with 4DVar, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 129, 3183–3203, 2003:



Список литературы V

-  van Leeuwen, P. J.: Particle filtering in geophysical systems, Mon. Weather Rev., 137, 4089–4114, 2009.
-  van Leeuwen, P. J.: Nonlinear data assimilation in geosciences: an extremely efficient particle filter , Quarterly journal of the Royal Meteorological Society, 136 Part B (653), 1991–1999, 2010.
-  Bocquet, M., Pires, C. A., and Wu, L. : Beyond Gaussian statistical modeling in geophysical data assimilation, Mon. Weather Rev., 138, 2997–3023, 2010.
-  V. Penenko, E. Tsvetova, *Variational methods for construction of monotone approximations for atmospheric chemistry models*, Numerical Analysis and Applications, 2013, V 6, No 3. 210-220



Список литературы VI

-  V.V. Penenko and E.A. Tsvetova and A.V. Penenko Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies // Computers Mathematics with Applications (2014) v.67 №. 12 2240 - 2256
-  А.В. Пененко, В.В. Пененко Прямой метод вариационного усвоения данных для моделей конвекции-диффузии на основе схемы расщепления, Вычислительные технологии Т.19, №4, 2014 69-83.
-  Didier Auroux Nudging methods in geophysical data assimilation Part 2 : Optimal nudging and comparisons // Presentation of Mathematical and Statistical Foundations of Data Assimilation, TIFR-CAM, Bangalore, India (2011).
-  А.БРАЙСОН, Хо Ю-Ши Прикладная теория оптимального управления. М.: Мир. 1972, 544 с.



Список литературы VII

-  ПЕНЕНКО В.В., ОБРАЗЦОВ, Н.Н. Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. 1976. №. 11. С. 1-11.
-  KALMAN R.E. A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems // Transactions of the ASME–Journal of Basic Engineering. 1960. Vol. 82. Ser. D. P. 35-45.
-  GORDON N.J., SALMOND D.J., SMITH A.F.M. Novel approach to nonlinear/non-Gaussian Bayesian state estimation // IEE-Proceedings-F. 1993. Vol. 140. P. 107-113.
-  V. Penenko, A. Baklanov, E. Tsvetova, A. Mahura *Direct and Inverse Problems in a Variational Concept of Environmental Modeling*, Pure Appl. Geophys. (2012) 169:447-465



Список литературы VIII

-  DIMET F.-X. L., TALAGRAND, O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus A. 1986. Vol. 38A. P. 97-110.
-  TALAGRAND O., COURTIER P. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation // Quart. J. Roy. Meteor. Soc. 1986. Vol. 113. No. 1: Theory. P. 1311-1328.
-  ELBERN H., STRUNK A., SCHMIDT H., TALAGRAND O. Emission rate and chemical state estimation by 4 -dimensional variational inversion // Atmos. Chem. Phys. 2007 . Vol. 7 . P. 3749 -3769 .
-  Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. «Численные методы решения некорректных задач» (1990)



Список литературы IX

-  Агошков В.И. Теория и методы решения задач вариационной ассимиляции образов. - М.: ИВМ РАН, 2012
-  FREITAG M.A., POTTHAST R.W.E. Synergy of inverse problems and data assimilation techniques // Large Scale Inverse Problems Computational Methods and Applications in the Earth Sciences: Radon Series on Computational and Applied Mathematics. 2013. Vol. 13. С. 1–54.
-  Самарский А.А., Вабищевич П.Н. «Вычислительная теплопередача», М.: Едиториал УРСС, (2003)
-  V.V. Penenko Methods of numerical modelling of atmposheric processes. Hydrometeoizdat (1981), Leningrad, pp.352

Список литературы X

-  MARCHUK G.I., ZALESNY V.B. A numerical technique for geophysical data assimilation problems using Pontryagin's principle and splitting-up method // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 1993. Vol. 8. №. 4. C. 311–326.
-  Kalman, Rudolph Emil A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems, Transactions of the ASME–Journal of Basic Engineering, (1960), v.82, Series D, 35–45.
-  V. V. Penenko *Variational methods of data assimilation and inverse problems for studying the atmosphere, ocean, and environment* Num. Anal. and Appl., 2009 V 2 No 4, 341-351.



Список литературы XI

-  William R. Stockwell and Wendy S. Goliff *Comment on “Simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm” by R. K. Srivastava et al.* JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH, 2002 V 107 No D22.
-  Nuterman R. et. al *High resolution forecast meteorology and chemistry for a Danish Urban Area* EMS 2011.
-  V. Penenko, E. Tsvetova, *Discrete-analytical methods for the implementation of variational principles in environmental applications* Journal of Computational and Applied Mathematics 226 (2009) 319-330
-  Пененко А.В. Дискретно-аналитические схемы для решения обратной коэффициентной задачи теплопроводности слоистых сред градиентными методами // Сиб. журн.вычисл.математики РАН. Сиб. отд-ние.- Новосибирск, 2012 - Т. 15 no. 4 - С. 393- 408



Список литературы XII

-  A. Penenko *Some theoretical and applied aspects of sequential variational data assimilation (In Russian)*, Comp. tech. v.11, Part 2, (2006) 35-40.
-  V. Penenko, E. Tsvetova, *Variational methods for construction of monotone approximations for atmospheric chemistry models*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 2013, V 2, No 3
-  Gery, M.W. G.Z. Whitten, J.P. Killus, and M.C. Dodge, A photochemical kinetics mechanism for urban and regional scale computer modeling, J. Geophys. Res., 94, 12, 952-12,956,1989
-  Hesstvedt, E.; Hov, O.; Isaacsen, I. Quasi-steady-state-approximation in air pollution modelling: comparison of two numerical schemes for oxidant prediction. Int. J. Chem. Kinet. 1978, 10, 971–994.



Список литературы XIII



А.В. Пененко, А.А. Сороковой, К.Е. Сорокова *Численная модель трансформации биоаэрозолей в атмосфере*, Оптика атмосферы и океана, 29, № 6(2016), 463-466.



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” // СибЖВМ (в печати) 2016
P. N. Antokhina, O. Y. Antokhinaa, B.D. Belana, A. V. Penenkob,c
ESTIMATION THE HEIGHT OF OZONE FORMATION IN THE
ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER // Proc.Spie

