



Алгоритмы обратного моделирования переноса и трансформации примесей в атмосфере

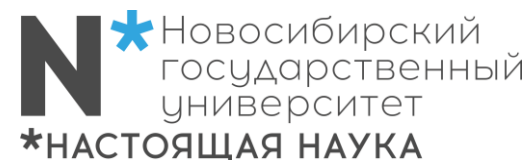
Пененко А.В.

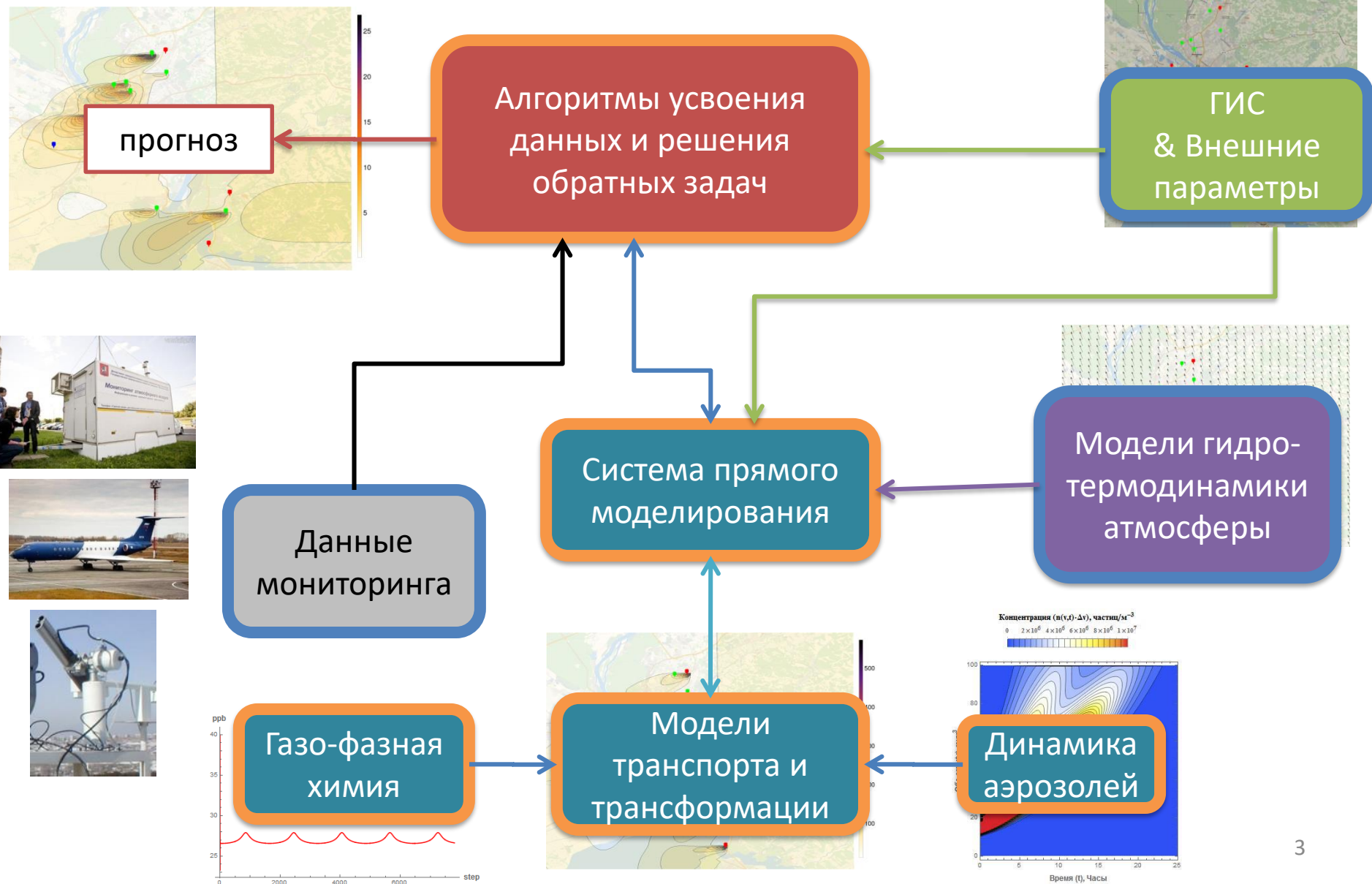
**Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
Новосибирский государственный университет**

**Международная конференция и школа молодых ученых по измерениям,
моделированию и информационным системам для изучения окружающей среды:
ENVIROMIS-2018, 5-11 июля 2018 года, Томск, Россия**

Команда

- Пененко В.В. (ИВМиМГ СО РАН, НГУ)
- Пененко А.В. (ИВМиМГ СО РАН, НГУ)
- Цветова Е.А. (ИВМиМГ СО РАН)
- Пьянова Э.А. (ИВМиМГ СО РАН)
- Антохин П.Н. (ИОА СО РАН, Томск)
- Гочаков А.В. (СибНИГМИ)
- Колкер А.Б. (СибНИГМИ)
- Мукатова Ж.С. (ИВМиМГ СО РАН, НГУ)
- Салимова А.Б. (НГУ)





Иерархия задач и вычислительная сложность

Вычислительная
сложность

IMDAF

- Система обратного моделирования и усвоения данных
ИВМиМГ СО РАН
ICM&MG Inverse Modeling and Data Assimilation Framework

Задачи
усвоения
данных

- Требуется строить прогноз в «реальном времени», уточняя параметры модели на основе поступающих данных измерений. Требуется решения последовательности связанных обратных задач с различными наборами данными измерений. Решение предыдущих как априорная информация для следующих.

Обратные
задачи

- Требуется найти неизвестную функцию состояния или неизвестные параметры по дополнительной информации. Может потребовать решения последовательности задач управления.

Задачи управления

- Требуется уточнить параметры моделей, чтобы приблизить модельные расчеты к данным измерений. Требуется решения последовательности прямых задач с различными параметрами моделей.

Прямые задачи

- Требуется смоделировать и исследовать динамику функции состояния модели при заданных параметрах и входных данных.

Необходимо гибкое управление сложностью подзадач

Содержание

- Введение
- Постановка задачи усвоения данных
- Вариационный алгоритм усвоения данных
- Пример усвоения данных
- Алгоритм решения обратных задач идентификации источников на основе оператора чувствительности
- Численные эксперименты по идентификации источников
- Заключение

Постановка задачи усвоения данных

- **Многомерные модели переноса и трансформации** ($l = 1, \dots, N_c$)

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi_l \vec{u} - \mu \operatorname{grad} \varphi_l) + S_l(\vec{\varphi}) = f_l + r_l, \quad \{\vec{x}, t\} \in D \times [0, T],$$

$$\mu \frac{\partial \varphi_l}{\partial \vec{n}} + \beta \varphi_l = g_l, \quad \{\vec{x}, t\} \in \partial D_{out} \subset \partial D \times [0, T],$$

$$\varphi_l = g_l, \quad \{\vec{x}, t\} \in \partial D_{in} \subset \partial D \times [0, T],$$

$$\varphi_l|_{t=0} = \varphi_l^0, \quad \vec{x} \in D.$$

- **Оператор измерений**

$$\vec{I} = \mathbf{H}(\vec{\varphi}) + \vec{\eta},$$

- **Параметры:** метеорологические $\vec{u}, \mu$, априорные источники $\vec{f}$, краевые и начальные условия $\vec{g}, \vec{\varphi}^0$.

- **Функции неопределенности (управления)** $\vec{r}, \vec{\eta}, \quad \|\vec{\eta}\| = \delta$.

- **Прямая задача:** Даны параметры и $\vec{r}, \vec{\eta}$, требуется найти $\vec{\varphi}, \vec{I}$.

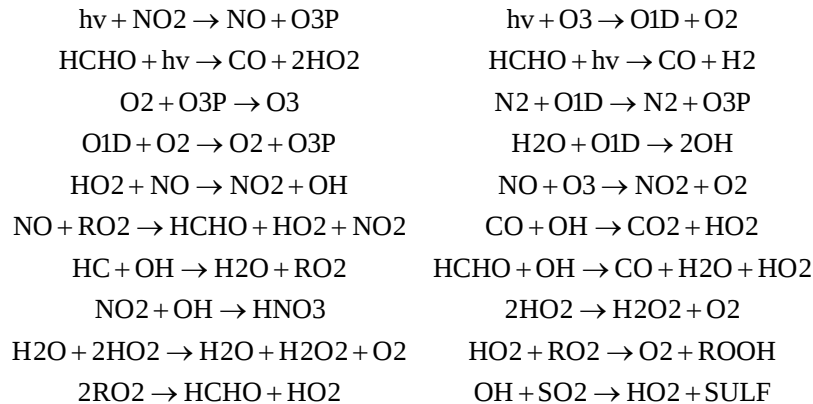
- **Задача усвоения данных:** Для последовательности $\{t_k^*\}_{k=1}^{N_{DA}} \in [0, T]$ найти $\vec{\varphi}, \vec{r}$ по данным $\vec{I}$ для $t \leq t_k^*$ (на каждом шаге формулируется обратная задача идентификации источников).

Модели продукции-деструкции

Оператор трансформации: $S_l = P_l(t, \vec{\phi})\varphi_l - \Pi_l(t, \vec{\phi}), \quad l = 1, \dots, N_c$

•Химическая кинетика

• [Stockwell,2002] (23 субстанции, 20 реакций)



•Модель RADM2 [Stockwell et al, 1990] (61 субстанция, 156 реакций)

Скорости химических реакций меняются во времени и зависят от приходящей солнечной радиации (фотохимия), параметров температуры, давления, влажности и т.д.

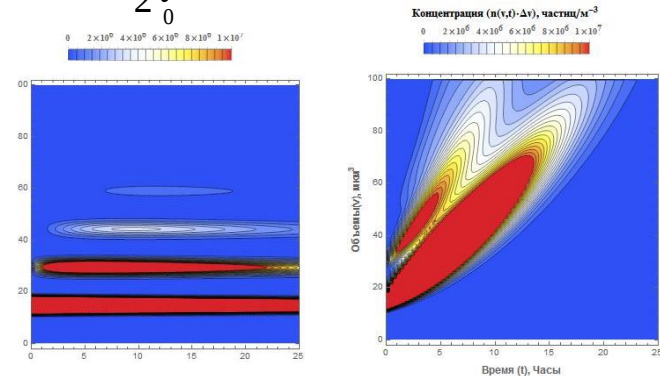
$$P_{\text{NO}}(t, \vec{\phi}) = (k_9[\text{HO}_2](t) + k_{10}[\text{O}_3](t) + k_{11}[\text{RO}](t)),$$

$$\Pi_{\text{NO}}(t, \vec{\phi}) = k_1(t)[\text{NO}_2](t),$$

•Динамика аэрозольных популяций

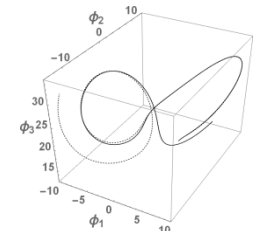
$$P(c; t, r) = \alpha_D(r) + \alpha_S(r) + \int_0^{r_{\max}} K(r, r')c(r', t)dr'$$

$$\Pi(c; t, r) = \frac{1}{2} \int_0^r K(q(r, r'), r')c(q(r, r'), t)c(r', t)w(r, r')dr'$$



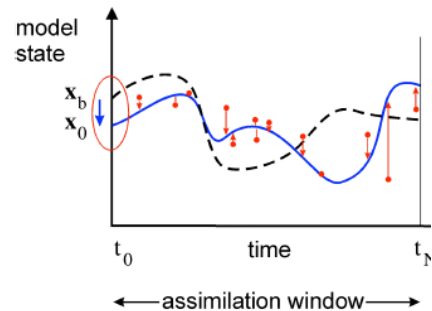
•Метеорология (модель Лоренца)

$$P(t, \vec{\phi}) = \begin{bmatrix} a \\ 1 \\ c \end{bmatrix}, \quad \Pi(t, \vec{\phi}) = \begin{bmatrix} a\varphi_2 \\ b\varphi_1 - \varphi_1\varphi_3 \\ \varphi_1\varphi_2 \end{bmatrix},$$



Алгоритмы усвоения данных

Обзоры [Sandu, Chai, 2011],
[Bocquet et. al. 2014].



Алгоритмы усвоения данных

Детерминированные

Стохастические

Гибридные

Nudging

Вариационные

([Sasaki, 1955]), [Penenko, Obraztsov, 1976],
[Dimet, Talagrand, 1986],
[Talagrand, Courtier, 1987]

4DVar

3DVar

ОЗ обращения оператора измерений (продолжения с постов мониторинга) на одном шаге по времени дискретной модели, решаемая вариационным методом. Модель входит в стабилизатор.

«3.5DVar»

ОЗ идентификации источника на одном шаге по времени дискретной модели

Динамическая Регуляризация [Осипов, 1999]

«Неявный» 3DVar

Сильные ограничения

ОЗ о поиске начальных данных, решаемая вариационным методом (метеорология)

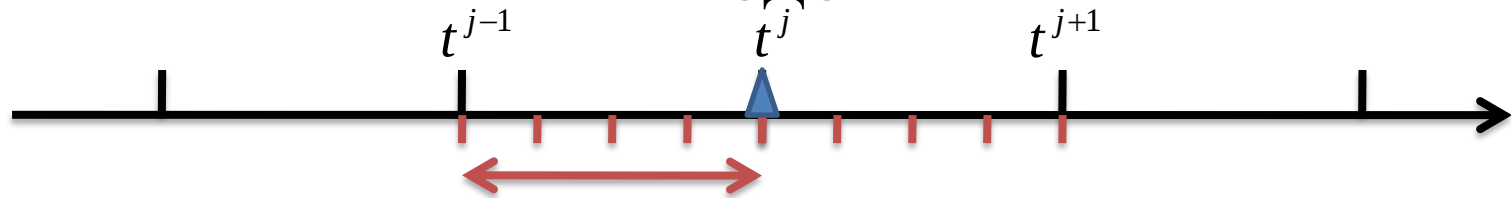
Слабые ограничения

ОЗ о поиске начальных данных и источника, решаемая вариационным методом (в химии атмосферы: [Fisher, Lary, 1995], [Elbern, Schmidt, 1999], [Fisher et al. 2005], [Elbern et al. 2007])

$$J(\varphi, r) = \|H\varphi - I\|^2 + \alpha \|r\|^2 \rightarrow \min$$

На ограничениях модели

Структура химико-транспортной модели



• На интервале $t^{j-1} \leq t \leq t^j$ рассмотрим схему расщепления (аналогично [Samarski, Vabishevich, 2003]), для разложения $\sum_{\xi \in \{x, y, z\}} \gamma_{\xi} + \gamma_c = 1$.

• Процессы переноса

$$\gamma_{\xi} \frac{\partial \vec{\phi}_{\xi}}{\partial t} + L_{\xi} \vec{\phi}_{\xi} = \vec{f}_{\xi} + \vec{r}_{\xi},$$

$$\{x, t\} \in [0, X_{\xi}] \times [t^{j-1}, t^j],$$

$$\vec{\phi}_{\xi}(t^{j-1}) = \vec{\phi}(t^{j-1}),$$

$$\xi \in \{x, y, z\}$$

«Неявный»
3DVAR

$$\vec{\phi}(t^{j-1})$$

• Процессы трансформации

$$\gamma_c \frac{\partial \vec{\phi}_c}{\partial t} + S(\vec{\phi}_c) = \vec{f}_c + \vec{r}_c,$$

$$t \in [t^{j-1}, t^j],$$

$$\vec{\phi}_c(t^{j-1}) = \vec{\phi}(t^{j-1}).$$

4DVAR со
слабыми
ограничениями

• Следующий шаг

$$\vec{\phi}(t^j) = \sum_{\xi \in \{x, y, z\}} \gamma_{\xi} \vec{\phi}_{\xi}(t^j) + \gamma_c \vec{\phi}_c(t^j).$$

Прямые алгоритмы вариационного усвоения данных для процессов переноса

$$J(\phi^j, r^j) = \sum_{i=0}^N \left(\frac{\phi_i^j - I_i^j}{\sigma_i} \right)^2 M_i^j + \alpha \sum_{i=0}^N (r_i^j)^2 + \beta \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{r_{i+1}^j - r_i^j}{\Delta x} \right)^2 \rightarrow \min$$

на ограничениях: $-L_i \phi_{i-1}^j + C_i \phi_i^j - R_i \phi_{i+1}^j = \phi_i^{j-1} + \tau f_i^j + \tau r_i^j, \quad i = 1, \dots, N$

дается решением трех-диагональной матричной СЛАУ (с матрицами 2x2 и 3x3)

$$-\tilde{R}_i \Phi_{i+1}^j + \tilde{C}_i \Phi_i^j - \tilde{L}_i \Phi_{i-1}^j = F_i^j, \quad \Phi_i^j = \begin{pmatrix} \phi_i^j \\ \phi_i^{*j} \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, N,$$

которая решается методом матричной прогонки (без итераций).

- Связь между результатом работы алгоритма и решением задачи усвоения данных (воспроизведение данных, функции состояния, источника):** Пененко А. Пененко В., Цветова Е. Последовательные алгоритмы усвоения данных в моделях мониторинга качества атмосферы на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями // **Сиб. журн. вычисл. матем.**, 2016, 19, С. 401-418
- Обобщение на нелинейный случай:** Гришина А. А., Пененко А. В. Моделирование кинетики химических реакций с использованием схем вариационного усвоения данных // **Вычислительные технологии**, 2017, 22, 27-43
- Обобщение на случай стабилизатора с производной функции управления:** Пененко, А.; Мукатова, Ж.; Пененко, В.; Гочаков, А. & Антохин, П. Численное исследование прямого вариационного алгоритма усвоения данных в городских условиях // **Оптика атмосферы и океана**, 2018, 31, 456-462

Прямая задача

$$\frac{d\phi_l}{dt} = -P_l(t, \vec{\phi})\phi_l + \Pi_l(t, \vec{\phi}) + r_l, \quad l = 1, \dots, N_c$$

Дискретно-аналитическая схема 1-го порядка

$$\phi_l^{j+1} = \phi_l^j L(P_l(t^j, \vec{\phi}^j)) + G(P_l(t^j, \phi^j))(\Pi_l(t^j, \vec{\phi}^j) + r_l^j),$$

$$L(P) = \begin{cases} 0 & P\Delta t > \varepsilon_{\max} \\ e^{-P\Delta t} & P\Delta t \in [\varepsilon_{\min}, \varepsilon_{\max}] \\ 1 - P\Delta t & 0 < P\Delta t < \varepsilon_{\min} < 1 \end{cases}, \quad G(P) = \begin{cases} 1/P & P\Delta t > \varepsilon_{\max} \\ \frac{1 - e^{-P\Delta t}}{P\Delta t} \Delta t & P\Delta t \in [\varepsilon_{\min}, \varepsilon_{\max}] \\ \Delta t & 0 < P\Delta t < \varepsilon_{\min} < 1 \end{cases}.$$

Сопряженная задача

$$\vec{\psi}^{j-1} = (\mathbf{W}^j)^* \vec{\psi}^j + h^j, \quad j = 1, \dots, \bar{N}_t - 1, \quad \psi^{\bar{N}_t-1} = h^{\bar{N}_t},$$

$$\mathbf{W}^j = \text{diag}_{l=1, \dots, N_c} L(P_l(t^j, \vec{\phi}^j)) + \left\{ S_l(t^j, \vec{\phi}^j, \vec{r}) \right\}_{l=1}^{N_c},$$

$$S_l(t, \vec{\phi}, \vec{r}) = G(P_l(t, \vec{\phi})) \nabla \Pi_l(t, \vec{\phi}) + (\phi_l L(P_l(t, \vec{\phi})) + G'(P_l(t, \vec{\phi}))(\Pi_l(t, \vec{\phi}) + r_l)) \nabla P_l(t, \vec{\phi}),$$

$$\sum_{j=1}^{N_t} \delta \vec{\phi}^j \cdot h^j = \delta \vec{\phi}^0 \cdot \vec{\psi}^0 + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta \vec{r}^j \cdot R(t^j, \vec{\phi}^j) \vec{\psi}^j$$

Тождество типа Лагранжа

Оптимизационная задача

$$J(\vec{r}) = \alpha \sum_{l=1}^{N_c} \left(\phi_l^{\bar{N}_t} - I_l \right)^2 M_l + \sum_{l=1}^{N_c} R_l(r_l)^2 \rightarrow \min$$

$$l = 1, \dots, N_c, \quad j = 1, \dots, \bar{N}_t.$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r}) = 2\alpha \sum_{j=1}^{\bar{N}_t-1} \left(F^j \right)^* \vec{\psi}^j + 2 \text{diag}_{l=1, \dots, N_c} (R_l) \vec{r},$$

$$F^j = \text{diag}_{l=1, \dots, N_c} \left(g(P_l(t^j, \vec{\phi}^j)) \right),$$

$$\vec{\psi} = \vec{\psi}(h), \quad h = 2M_l \left(\phi_l^{\bar{N}_t} - I_l \right),$$

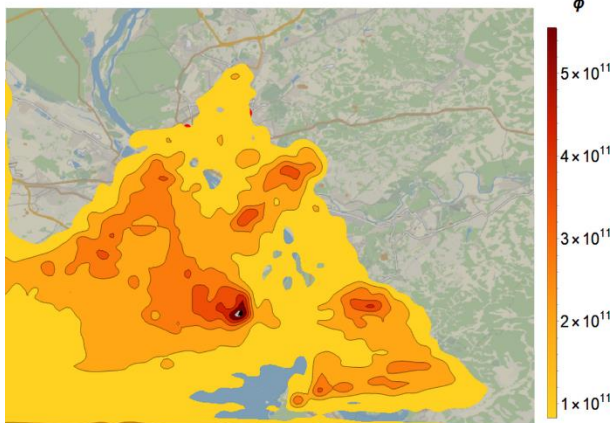
Учет априорной информации: метод проекции градиента или веса в стабилизаторе

Результат усвоения данных

3D модель с трансформацией (интервал 2 мин)

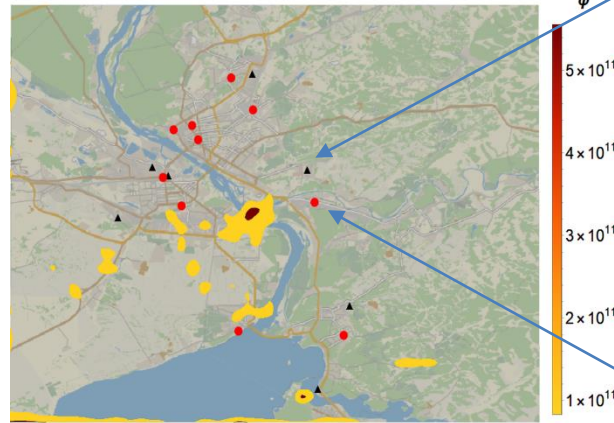
«Точное
Решение»

N02 t=08:39 Exact



(a)

N02 t=08:39 NO DA



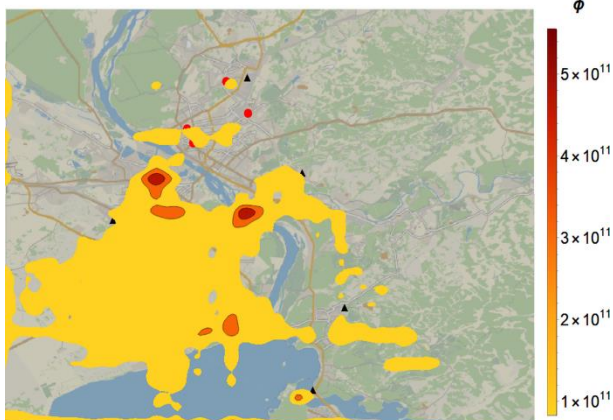
(b)

Источники
CO, SO2, NO.

«Без
Усвоения»

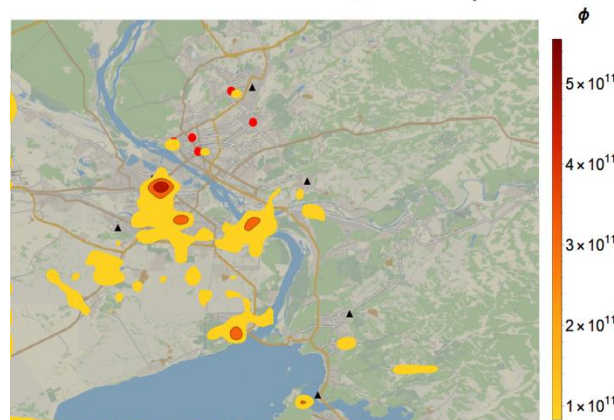
9 постов
измерений CO,
SO2, O3, NO2,
с шагом в 2
минуты

N02 t=08:39 DA $\rho=0$ $\eta=10$



(c)

N02 t=08:39 DA $\rho=10^{-6}$ $\eta=0$



(d)

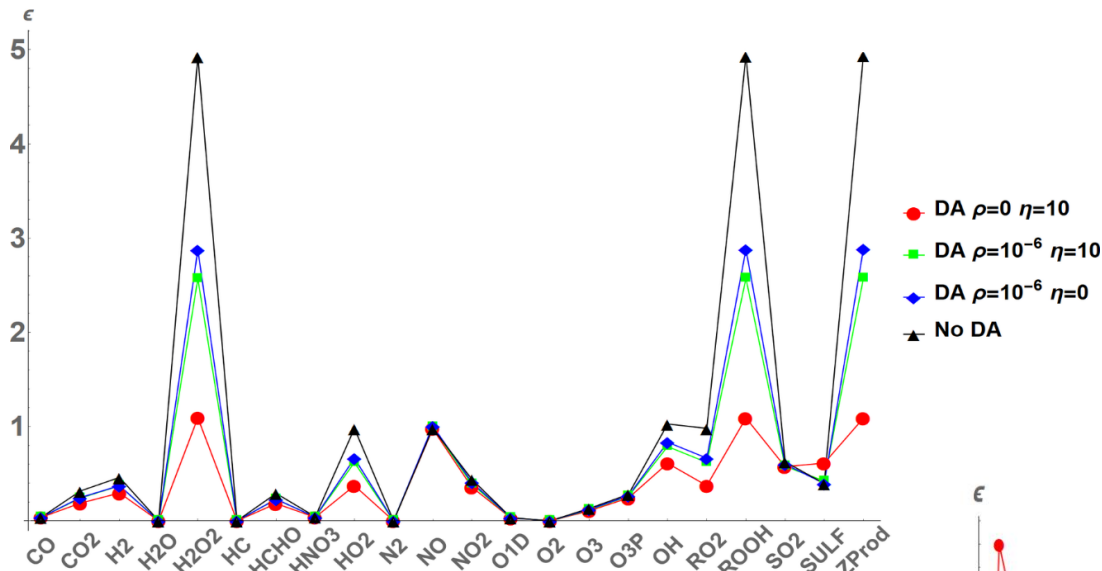
Усвоение
данных
Модификация
для
редких
загрязнителей

Усвоение
данных
Модификация
для
рутинных
загрязнителей

Для вычислений использовались мощности Сибирского суперкомпьютерного центра

Ошибка усвоения данных

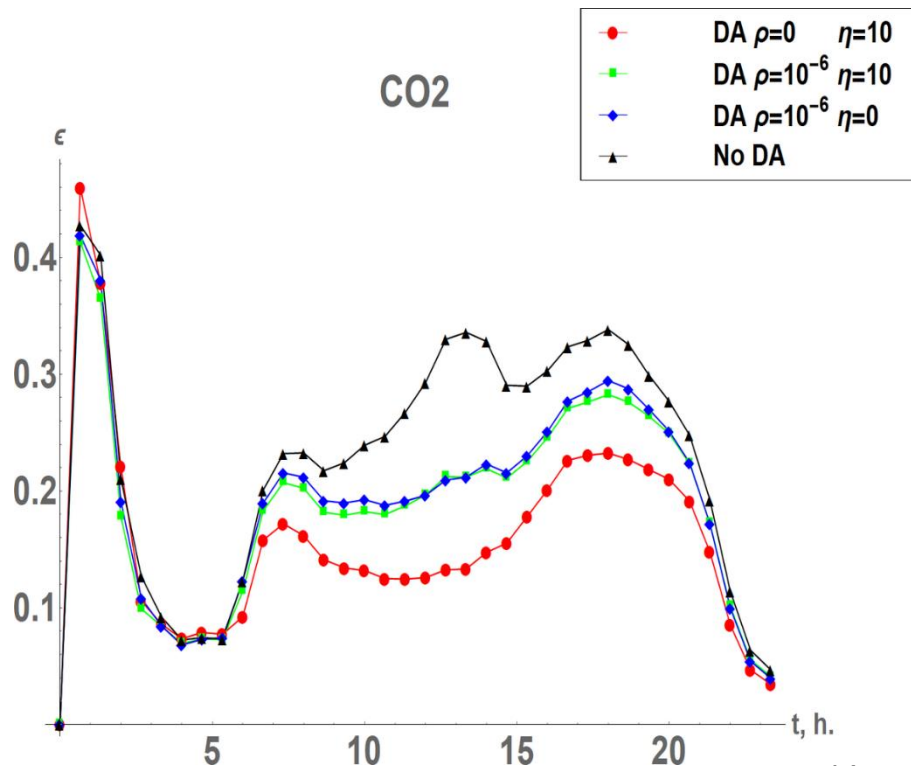
Relative error



Относительная ошибка
на всем интервале времени
для всех рассматриваемых веществ

Динамика относительной
ошибки для заданного
вещества

CO2



Мотивация

- В основе разрабатываемых алгоритмов усвоения данных лежит обратная задача поиска источников.
- Системы мониторинга состава атмосферы переходят от точечных измерений к данным типа изображений:
 - Временные ряды (с дискретностью до 1 минуты).
 - Вертикальные профили концентрации (самолетное зондирование, лидарные профили, и т.д.).
 - Спутниковые изображения.
- Большие объемы информации с неопределенной ценностью относительно рассматриваемой задачи обратного моделирования.
- Современный технологический контекст (НРС):
 - Число последовательных действий должно быть уменьшено.
 - Увеличено количество параллельных вычислений.

Модель адвекции-диффузии-реакции

Область $\Omega_T = [0, X] \times [0, Y] \times [0, T] \quad (= [0, X] \times [0, T], = [0, T])$

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial t} + \text{div}(\vec{u} \varphi_l) - \text{div}(\text{diag}(\mu) \text{grad} \varphi_l) + P_l(t, \varphi) \varphi_l = \Pi_l(t, \varphi) + f_l + r_l, \quad (\vec{x}, t) \in \Omega_T,$$

$$\varphi_l = g_l, \quad (\vec{x}, t) \in \partial \Omega_T / \{t = 0\}, \quad \varphi_l = \varphi_l^0, \quad \vec{x} \in \Omega, t = 0, \quad l = 1, \dots, N_c$$

Пусть $\varphi[\mathbf{r}]$ решение прямой задачи

Данные измерений

Для $l \in L_{mes} \quad \varphi_l[\mathbf{r}^{(*)}] = I_l + \delta I_l$

Временные ряды

(2D, 1D, 0D) с шумом

Обратная задача

$$A: \begin{cases} F \rightarrow U_{mes} \\ \mathbf{r} \mapsto \left\{ \begin{cases} \varphi_l[\mathbf{r}], l \in L_{mes} \\ 0, l \notin L_{mes} \end{cases} \right\}_{l=1}^{N_c}, \end{cases}$$

$$I = A(\mathbf{r}^{(*)}) + \delta I,$$

$$U_{mes} = \left\{ \left\{ \begin{cases} h_l, l \in L_{mes} \\ 0, l \notin L_{mes} \end{cases} \right\}_{l=1}^{N_c} \mid h_l \in L_2(\Omega_T) \right\},$$

$$\varphi^0 \in \mathbb{R}^{N_c}, I \in U_{mes} \quad \text{известны}$$

$$\delta I \in U_{mes} \quad \text{частично известны (e.g. норма или распределение)}$$

Сопряженная задача

Тождество типа Лагранжа (соотношение чувствительности)

$$\langle h, \delta\varphi \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})} = \delta\varphi^0 \cdot \Psi[r^{(2)}, r^{(1)}, h](0) + \langle \delta r, \Psi[r^{(2)}, r^{(1)}, h] \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})},$$

$$\dots: \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c} \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R} \\ \{a, b\} \mapsto a^T \text{diag}(\rho) b = \sum_{l=1}^{N_c} a_l b_l \rho_l \end{array} \right\}, \quad \langle \cdot, \cdot \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})} : \left\{ \begin{array}{l} L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c}) \times L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c}) \rightarrow \mathbb{R} \\ \{h, \varphi\} \mapsto \int_{\Omega_T} h(t) \cdot \varphi(t) dx dt \end{array} \right\},$$

$$-\frac{\partial \Psi_l}{\partial t} - \bar{u} \text{grad}(\Psi_l) - \text{div}(\text{diag}(\mu) \text{grad} \Psi_l) + (G(t, \varphi[r^{(2)}], \varphi[r^{(1)}]) \Psi)_l = h_l,$$

$$(\vec{x}, t) \in \Omega_T,$$

$$G(t, \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)}) = \text{diag}(P(t, \varphi^{(2)})) + \bar{\nabla} P(t, \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)})^* \text{diag}(\varphi^{(1)}) - \bar{\nabla} \Pi(t, \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)})^*,$$

$$\Psi = 0, (\vec{x}, t) \in \partial\Omega_T / \{t = T\}, \quad \Psi(T) = 0,$$

Пусть $\Psi[r^{(2)}, r^{(1)}, h]$ Обозначает решение сопряженной задачи и

$S(t, \varphi + \delta\varphi) - S(t, \varphi) = \bar{\nabla} S(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi$ оператор разделенных разностей

Градиентные алгоритмы

Задан целевой функционал

$$J(r) = \sum_{l \in L_{mes}} \left\| \varphi_l[\varphi^0, r] - I_l \right\|_{L_2(\Omega_T)}^2 \rho_l.$$

Если параметры достаточно гладкие, то

$$\nabla J(r) = \Psi[r, r, h], \quad h = \left\{ \begin{cases} 2(\varphi_l[r] - I_l), & l \in L_{mes} \\ 0, & l \notin L_{mes} \end{cases} \right\}_{l=1}^{N_c}.$$

Например алгоритм сопряженных градиентов Полака-Рибьера

$$r^{(k+1)} := r^{(k)} - \alpha^{(k)} s^{(k)}, \quad \alpha^{(k)} = \arg \min_{\alpha > 0} J(r^{(k)} - \alpha s^{(k)}),$$

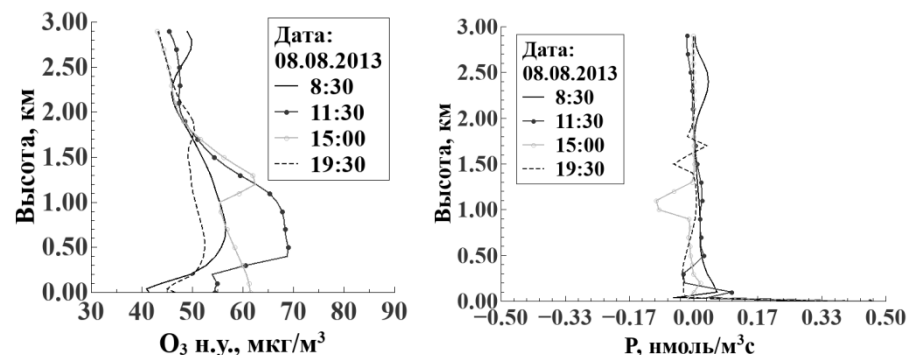
$$s^{(k)} = \begin{cases} g^{(k)} + \beta^{(k)} s^{(k-1)}, & k > 1 \\ g^{(k)}, & k = 1 \end{cases}, \quad \beta^{(k)} = \frac{\langle g^{(k)}, g^{(k)} - g^{(k-1)} \rangle}{\langle g^{(k-1)}, g^{(k-1)} \rangle}, \quad g^{(k)} = -\nabla_r J(r^{(k)}).$$

•Метод представителей [Bennet, 1992], [Iglesias, Dawson, 2009]

Поиск области синтеза и распада озона по профилям концентраций



$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + f, \quad (z, t) \in D_T, \\ -\mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \beta_L \varphi &= \alpha_L, \quad z=0, \quad t \in (0, T), \\ \mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \beta_R \varphi &= \alpha_R, \quad z=Z, \quad t \in (0, T), \\ \varphi &= \varphi^0, \quad t=0, \quad z \in (0, Z), \\ \varphi(z, \bar{t}_m) &= I_m(z) + \delta I_m(z), \quad z \in (Z_{\min}, Z), \\ \bar{t}_m &\in (0, T), \quad m=1, \dots, M \end{aligned}$$



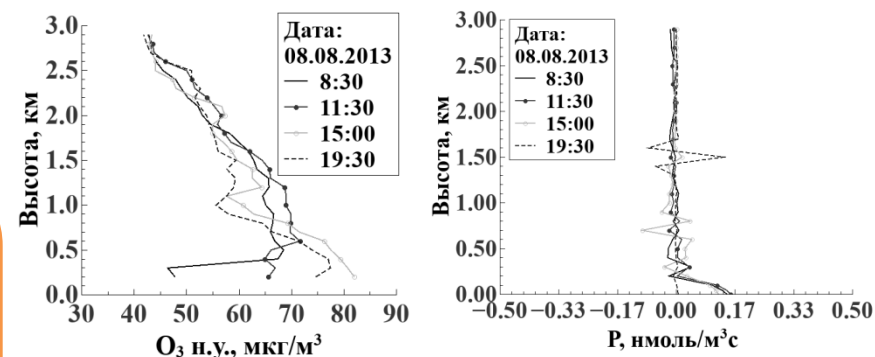
Синтетические данные WRF-Chem

Основная сложность: восстановление динамики по конечному числу высотных профилей

Целевой функционал Тихонова:

$$J_{\alpha}(\vec{f}) = \sum_{m=1}^M \sum_{i=i_{\min}}^N \left(\phi_i^{\bar{t}_m}[\vec{f}] - I_m(z_i) \right)^2 \delta z_i + \alpha \Omega[\vec{f}],$$

1. Найти правдоподобный параметрический источник, который удовлетворяет данным.
2. По найденному источнику сгенерировать синтетические данные и оценить параметр регуляризации.
3. Использовать параметр регуляризации для восстановления источников по реальным данным.



Реальные данные самолетного зондирования

Антохин, П.; Пененко, А. & Антохина, О. Алгоритм восстановления вертикального распределения мощностей источников и стоков субстанции в пограничном слое атмосферы // **Оптика атмосферы и океана**, 2018, 31, 49–56

Оператор чувствительности

Задана система Ξ функций $U = \{u_\xi\}_{\xi \in \Xi} \subset L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})$

Оператор извлечения структуры [Dimet et al, 2015]

$$H_U(A(r_2) - A(r_1)) = \sum_{\xi \in \Xi} \langle A(r_2) - A(r_1), u_\xi \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})} e_\xi,$$

Соотношение чувствительности (соотношение типа Лагранжа)

$$\langle A(r_2) - A(r_1), u_\xi \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})} = \langle \Psi[r_2, r_1; u_\xi], r_2 - r_1 \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})}.$$

Оператор
Чувстви-
тельности

$$M_U[r_2, r_1]: \begin{cases} F \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ z \mapsto \sum_{\xi \in \Xi} \langle \Psi[r_2, r_1; u_\xi], z \rangle_{L_2(\Omega_T; \mathbb{R}_{\rho}^{N_c})} e_\xi \end{cases}, \quad H_U(A(r_2) - A(r_1)) = M_U[r_2, r_1](r_2 - r_1),$$

Параллельно по U

**Marchuk G. I., On the formulation of certain inverse problems,
Dokl. Akad. Nauk SSSR, 156:3 (1964), 503–506.**

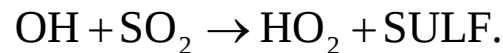
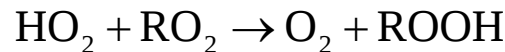
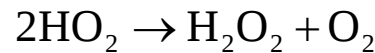
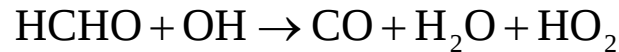
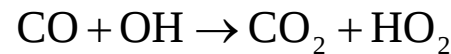
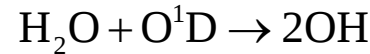
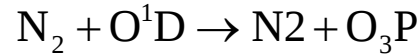
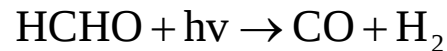
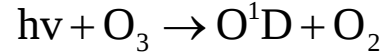
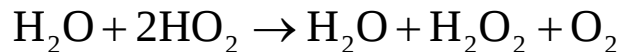
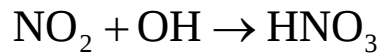
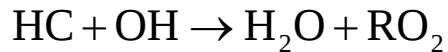
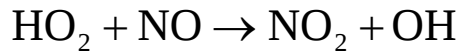
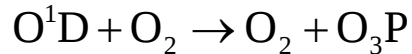
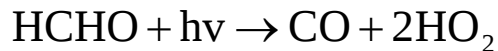
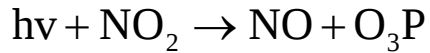
Решение обратной задачи $r^{(*)}$ для любого r и U удовлетворяют

$$H_U(I - A(r)) = M_U[r^{(*)}, r](r^{(*)} - r) + H_U \delta I.$$

**Семейство квазилинейных
операторных уравнений** 19

Восстановление источника по временным рядам концентраций

[Stockwell,2002]



Photochemical reactions rates depend on time (of day)

$$L_{mes} = \{ \text{CO}_2, \text{O}_3 \}$$

$$L_{src} = \{ \text{NO}, \text{NO}_2 \}$$

$$r^{(0)} = 0$$

$$T = 10 \times 3600$$

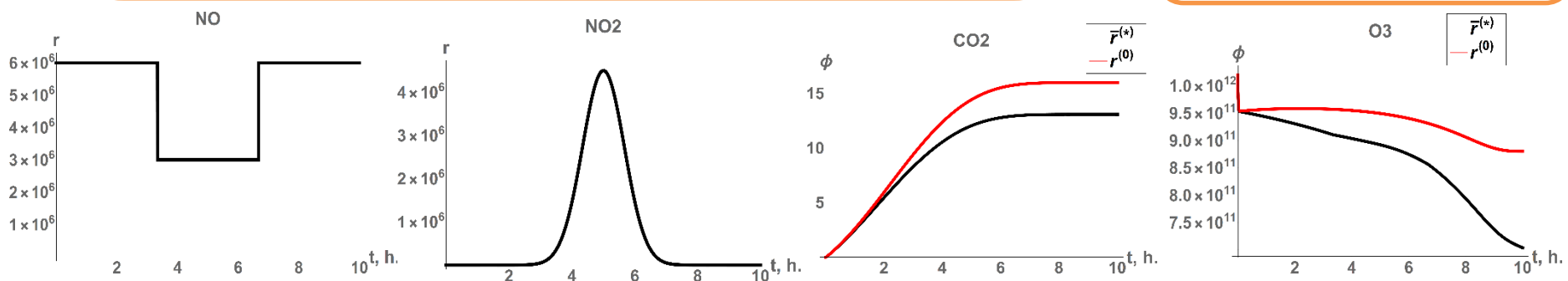
$$N_t = 3000$$

$$N_c = 22$$

$$N_p = 25$$

$$\rho_{\text{CO}_2} = 10^{12}$$

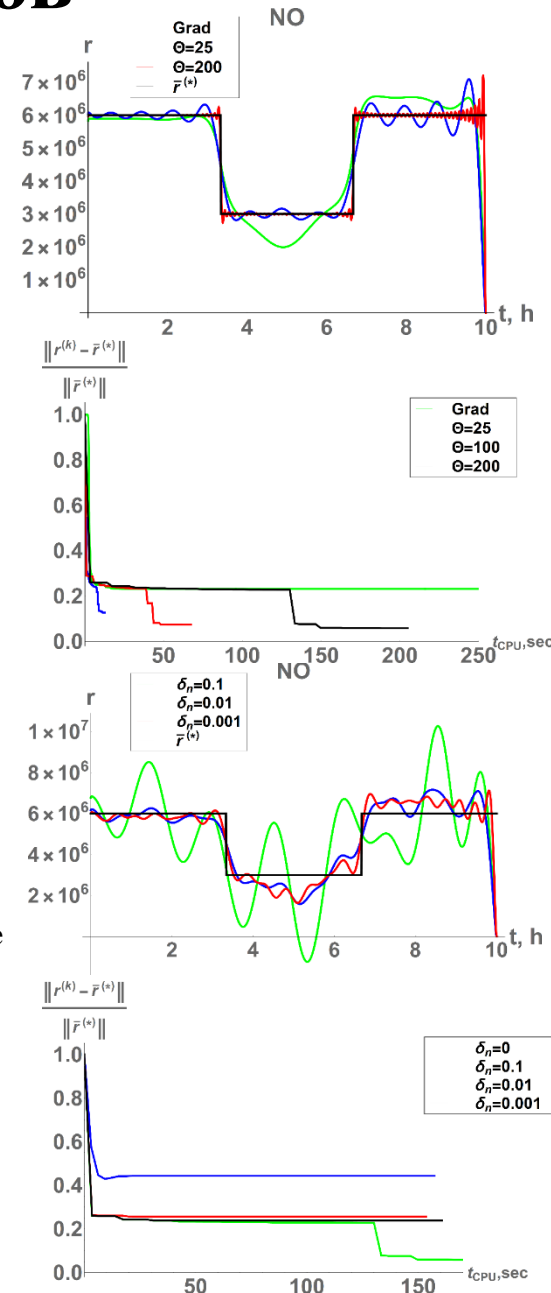
$$\rho_{\text{O}_3} = 1$$



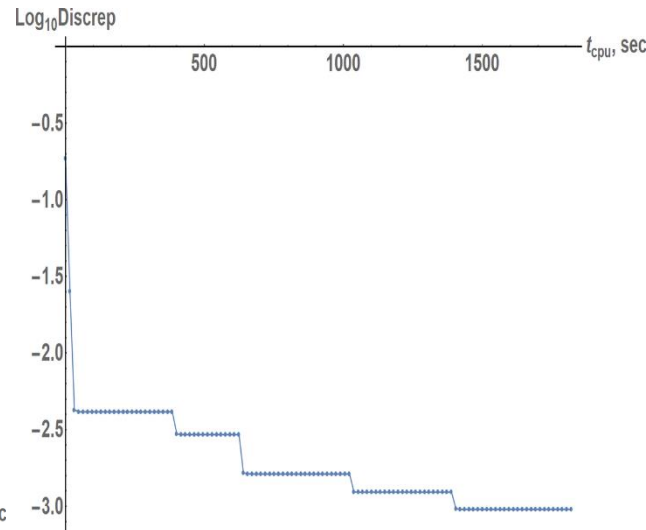
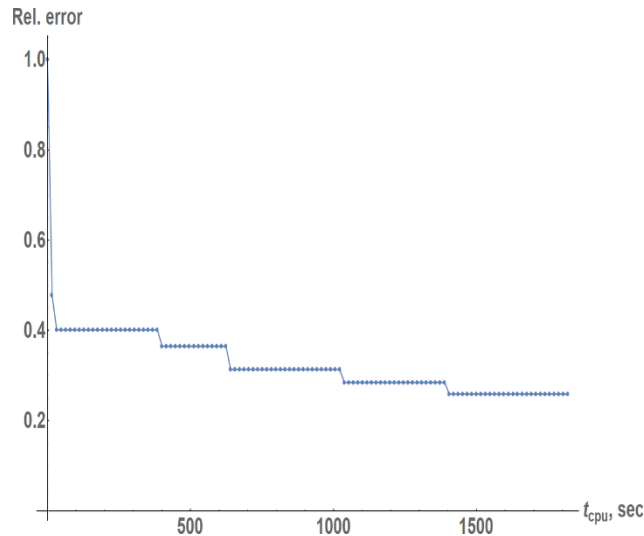
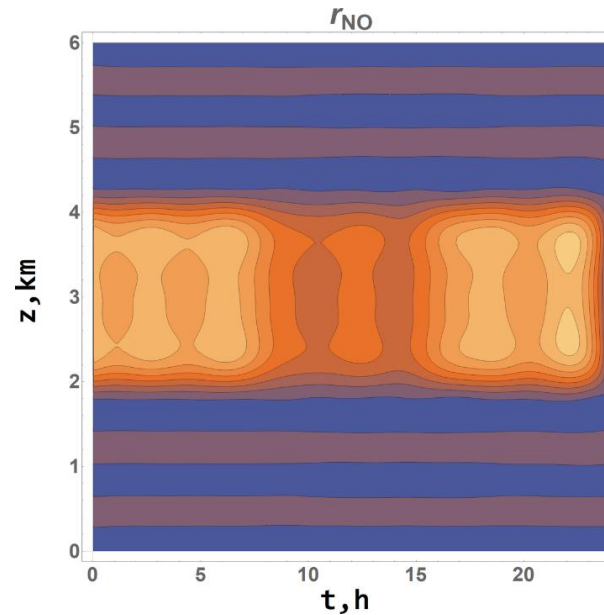
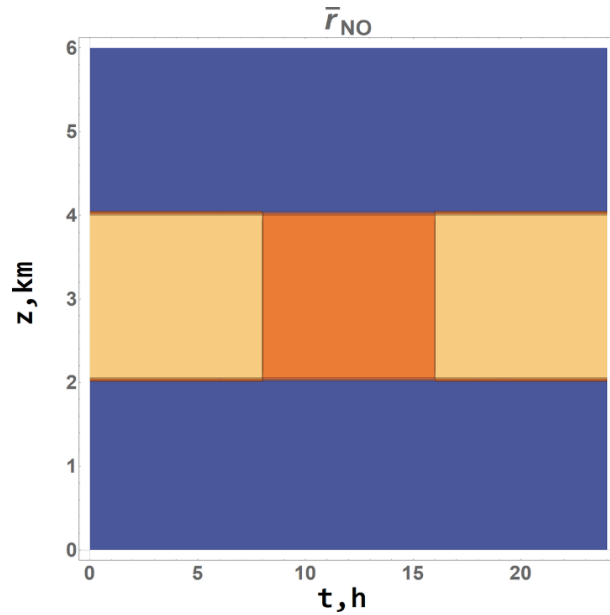
Применение операторов чувствительности

- Обратная задача в виде системы дифференциальных уравнений преобразуется в семейство интегральных уравнений (некорректных задач).
- Возможность применять методы решения и анализа некорректных задач (например, методы сингулярного разложения).
- Позволяет решать обратную задачу методами ньютоновского типа.
- Там, где «много» данных «неизвестной ценности» (например, спутниковые снимки), левые сингулярные векторы оператора чувствительности можно использовать для перехода к информативному базису.
- Вычисление оператора чувствительности эффективно распараллеливается (эквивалентно вычислению градиента целевого функционала)

1. **Поиск коэффициента диффузии по томографическим снимкам:** Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии / А.В. Пененко, С.В. Николаев, С.К. Голушко и др. // **Мат. биол. и биоинф.** — 2016. — dec. — Т. 11, № 2. — С. 426–444.
2. **Поиск коэффициента диффузии по временным рядам :** Пененко А. О решении обратной коэффициентной задачи теплопроводности методом проекции градиента // **Сибирские электронные математические известия.** — 2010. — Т. 23. — С. 178–198. — в сб. «Труды первой международной молодежной школы-конференции "Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач" Часть I».
3. **Поиск источника для модели продукции-деструкции:** Пененко, А. Согласованные численные схемы для решения нелинейных обратных задач идентификации источников градиентными алгоритмами и методами Ньютона-Канторовича // **Сиб. журн. вычисл. матем.**, 2018 , 21 , 99-116
4. **Поиск источника для модели продукции-деструкции с данными временных рядов:** Penenko, A. Newton-Kantorovich method in inverse source problems for production-destruction models with timeseries-type measurement data (positive reviews).



Восстановление источника по 1-D профилям полей концентрации



$$L_{mes} = \{O_3\}$$

$$L_{src} = \{NO\}$$

$$r^{(0)} = 0$$

$$T = 10 \times 3600$$

$$N_t = 3000$$

$$X = 6000$$

$$N_x = 100$$

$$N_c = 22$$

$$N_p = 25$$

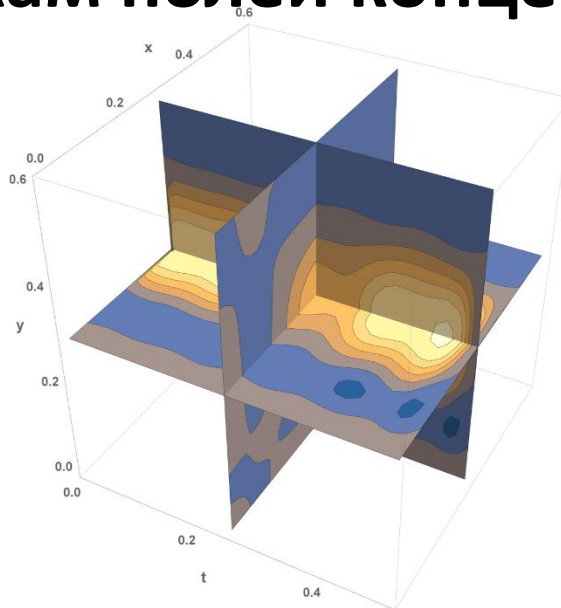
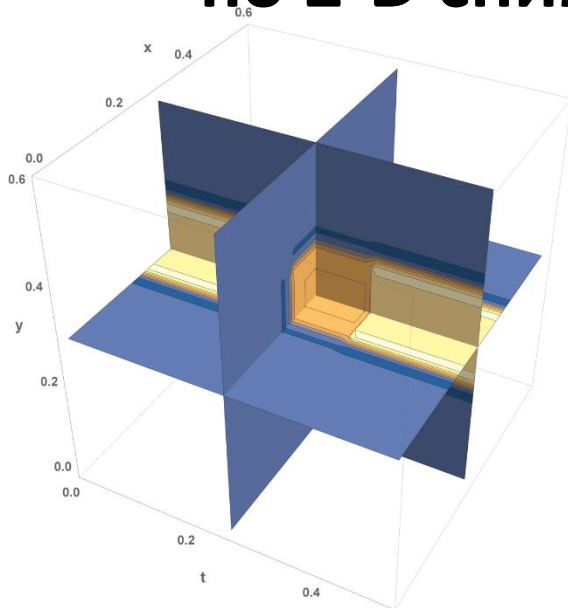
$$\theta_x = \theta_t = 15$$



$$N_{cores} = 64$$

omp

Восстановление источника по 2-D снимкам полей концентрации



$$L_{mes} = \{O_3\}$$

$$L_{src} = \{NO\}$$

$$r^{(0)} = 0$$

$$T = 0.5 \times 3600$$

$$N_t = 100$$

$$X = Y = 600$$

$$N_x = 100$$

$$N_c = 22$$

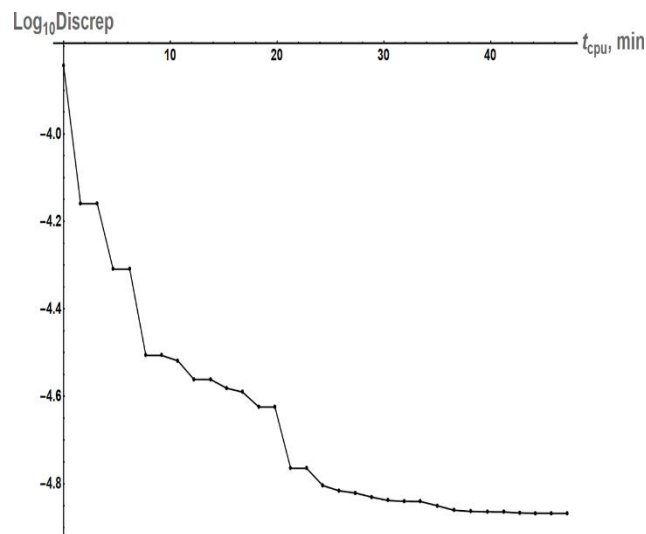
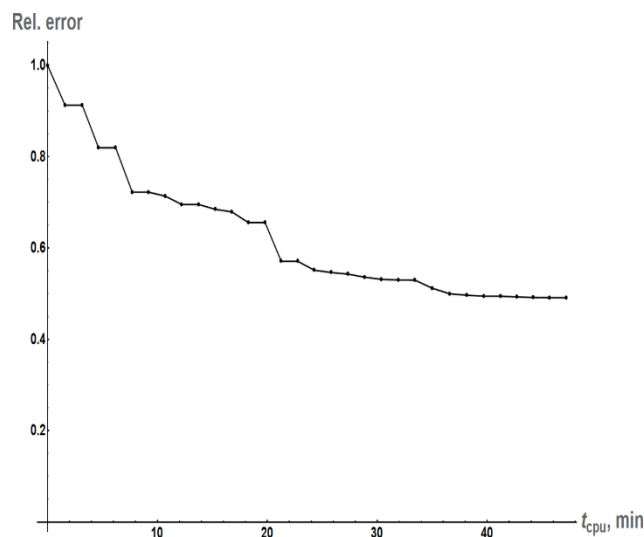
$$N_p = 25$$

$$\theta_x = \theta_y = 5$$

$$\theta_t = 10$$

$$N_{cores} = 8$$

$$omp$$



Заключение

- 1. Задача усвоения данных рассматривается как последовательность связанных обратных задач с различными наборами данных измерений. Решения предыдущих являются априорной информацией для следующих.**
- 2. Разработана схема вариационного усвоения данных на основе метода расщепления для модели адвекции-диффузии-реакции.**
- 3. Для модели адвекции-диффузии разработан прямой алгоритм решения задачи вариационного усвоения данных контактных измерений.**
- 4. Для моделей адвекции-диффузии и реакции разработаны наборы согласованных в смысле тождества Лагранжа дискретно-аналитических численных схем для решения прямых и сопряженных задач.**
- 5. Для решения и анализа нелинейных обратных задач методами теории некорректных задач построены операторы чувствительности. На их основе разработан алгоритм решения обратных задач.**
- 6. Разработанные алгоритмы использованы для решения практически-важных задач в областях моделирования химии атмосферы и живых систем.**

Спасибо за внимание!

Работа поддержана:

- **Проектом РНФ № 17-71-10184 (Работа с данными типа изображений с помощью операторов чувствительности)**
- **Тема гос.задания ИВМиМГ СО РАН № 0315-2016-0004 (Разработка вариационных алгоритмов усвоения данных)**
- **Проектом РФФИ и администрации новосибирской области № 17-41-543309 (адаптация алгоритмов к условиям города Новосибирска)**
- **Министерством образования и науки Российской Федерации 4.1.3 Совместные лаборатории НГУ-ННЦ СО РАН. (Векторизация и оптимизация программ для СуперЭВМ).**
- **Суперкомпьютерные вычисления выполнены на мощностях Сибирского суперкомпьютерного центра.**

Основные публикации

1. Penenko, A. Newton-Kantorovich method in inverse source problems for production-destruction models with timeseries-type measurement data // **Positive reviews to Siberian J. Num. Math. (Numerical Analysis and Applications)**.
2. Penenko, A. V. Consistent Numerical Schemes for Solving Nonlinear Inverse Source Problems with Gradient-Type Algorithms and Newton-Kantorovich Methods // **Numerical Analysis and Applications**, Pleiades Publishing Ltd, 2018, 11, P.73-88 doi: 10.1134/s1995423918010081
3. Пененко А., Пененко В., Цветова Е. Последовательные алгоритмы усвоения данных в моделях мониторинга качества атмосферы на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями // **Сиб. журн. Вычисл. матем.** — 2016. — Т. 19, № 4. — С. 401–418.
4. Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии / А.В. Пененко, С.В. Николаев, С.К. Голушко и др. // **Мат. биол. и биоинф.** — 2016. — dec. — Т. 11, № 2. — С. 426–444.
5. Пененко, А. В. Дискретно-аналитические схемы для решения обратной коэффициентной задачи теплопроводности слоистых сред градиентными методами // **Сиб. журн. вычисл. матем.**, 2012, 15, С. 393–408.
6. Пененко А., Пененко В. Прямой метод вариационного усвоения данных для моделей конвекции-диффузии на основе схемы расщепления // **Выч. тех.** — 2014. — Т. 19, № 4. — С. 69–83.
7. Кабанихин С. И., Хасанов А., Пененко А. В. Метод градиентного типа для решения обратной коэффициентной задачи теплопроводности // **Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние.** — 2008. — Т. 11, № 1. — С. 41–54.
8. Kabanikhin S. I., Penenko A. V. Convergence analysis of gradient descend methods generated by two different functionals in a backward heat conduction problem // **Journal of Inverse and Ill-posed Problems.** — 2009. — jan. — Vol. 17, no. 7.
9. Penenko V., Tsvetova E., Penenko A. Variational approach and euler's integrating factors for environmental studies // **Computers & Mathematics with Applications.** — 2014. — jul. — Vol. 67, no. 12. — P. 2240–2256.
10. Penenko V. V., Penenko A. V., Tsvetova E. A. Variational approach to the study of processes of geophysical hydro-thermodynamics with assimilation of observation data // **Journal of Applied Mechanics and Technical Physics.** — 2017. — Vol. 58, no. 5. — P. 771–778
11. Пененко А., А.А.Сороковой, Сороковая К. Численная модель трансформации биоаэрозолей в атмосфере // **Оптика атмосферы и океана.** — 2016. — Т. 29, № 6. — С. 462–466.
12. Пененко В., Цветова Е., Пененко А. Методы совместного использования моделей и данных наблюдений в рамках вариационного подхода для прогнозирования погоды и качества состава атмосферы // **Метеорология и гидрология.** — 2015. — № 6. — С. 13–24.
13. Применение технологии CUDA для моделирования процессов реакции-диффузии на двумерном клеточном ансамбле / А. Пененко, Троеглазова Т., У. Зубаирова и др. // **Мат. биол. и биоинф.** — 2014. — dec. — Т. 9, № 2. — С. 491–503.
14. Пененко А. О решении обратной коэффициентной задачи теплопроводности методом проекции градиента // **Сибирские электронные математические известия.** — 2010. — Т. 23. — С. 178–198. — в сб. «Труды первой международной молодежной школы-конференции "Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач «Часть I»».
15. Пененко А. В. Некоторые теоретические и прикладные вопросы последовательного вариационного усвоения данных // **Выч. тех.** — 2006. — Т. 11, № Спец.выпуск ч.2. — С. 35–40.

Литература

1. [WHO, 2006] Air Quality Guidelines Global Update 2005: Particulate Matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide (A EURO Publication) World Health Organization, 2006.
2. [Sandu,Chai,2011] Sandu, A. & Chai, T. Chemical Data Assimilation - An Overview // Atmosphere, MDPI AG, 2011 , 2 , 426-463
3. [Bocquet et. al. 2015] Bocquet, M.; Elbern, H.; Eskes, H.; Hirtl, M.; & Zcaron;abkar, R.; Carmichael, G. R.; Flemming, J.; Inness, A.; Pagowski, M.; Camaño, J. L. P.; Saide, P. E.; Jose, R. S.; Sofiev, M.; Vira, J.; Baklanov, A.; Carnevale, C.; Grell, G. & Seigneur, C. Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmospheric Chemistry and Physics Discussions, Copernicus GmbH, 2014 , 14 , 32233-32323
4. [Sasaki,1955] Sasaki, Y. A Fundamental Study of the Numerical Prediction Based on the Variational Principle // Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II, Meteorological Society of Japan, 1955 , 33 , 262-275
5. [Penenko, Obraztsov, 1976] Пененко, В. & Образцов, Н. Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология, 1976 , 13 , 1-11
6. [Dimet, Talagrand, 1986] Dimet, F.-X. L. & Talagrand, O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus, 1986 , 38A , 97-110
7. [Talagrand,Courtier,1986] Talagrand, O. & Courtier, P. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. Part 1: Theory // Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 1987 , 113 , 1311-1328
8. [Fisher, Lary, 1995] Fisher, M. & Lary, D. J. Lagrangian four-dimensional variational data assimilation of chemical species // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, Wiley-Blackwell, 1995 , 121 , 1681-1704
9. [Elbern, Schmidt, 1999] Elbern, H. & Schmidt, H. A four-dimensional variational chemistry data assimilation scheme for Eulerian chemistry transport modeling // Journal of Geophysical Research: Atmospheres, Wiley-Blackwell, 1999 , 104 , 18583-18598
10. [Fisher et al. 2005] Fisher, M.; Leutbecher, M. & Kelly, G. A. On the equivalence between Kalman smoothing and weak-constraint four-dimensional variational data assimilation // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, Wiley-Blackwell, 2005 , 131 , 3235-3246
11. [Elbern et al. 2007] Elbern, H.; Strunk, A.; Schmidt, H. & Talagrand, O. Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion // Atmospheric Chemistry and Physics Discussions, Copernicus GmbH, 2007 , 7 , 1725-1783
12. [Осипов, 1999] Осипов, Ю.; Васильев, Ф. & Потапов, М. Основы метода динамической регуляризации Изд-во МГУ, 1999
13. [Samarski, Vabishevich, 2003] Самарский, А. А. & Вабищевич, П. Н. Вычислительная теплопередача УРСС, 2003
14. [Марчук, 1964] Марчук, Г. О постановке некоторых обратных задач // Доклады Академии Наук СССР / Изд. Наука, 1964 , 156 , 503–506