

# ВАРИАЦИОННОЕ УСВОЕНИЕ ДАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛЕЙ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ-РЕАКЦИИ

Алексей Владимирович Пененко и Владимир Викторович Пененко  
aleks@ommgp.sccc.ru

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

Абрау-Дюрсо 2013



# Особенности задач усвоения данных

Цель применения алгоритмов усвоения данных - улучшение прогноза на основе математической модели с использованием данных измерений.

- Решение задачи обращения оператора наблюдений в большинстве случаев неединственно (Данных измерений недостаточно для нахождения всех неизвестных).
- Интерес представляет текущее (и будущее) состояния системы.
- Важно организовать решения так, чтобы получать решение в "реальном времени", т.к. ситуация быстро устаревает.
- Желательно разрабатывать алгоритмы усвоения, которые будут использовать существующие математические модели или "встраиваться" в них.



## Модели конвекции-диффузии-реакции

Многомерные математические модели, описывающие процессы транспорта и трансформации тепла, влаги, радиации и примесей имеют следующую общую структуру:

$$L(\vec{Y})\vec{\phi} \equiv \frac{\partial \vec{\phi}}{\partial t} + \text{div}(\vec{\phi}\vec{u} - \mu \text{grad } \vec{\phi}) = S(\vec{\phi}) + \vec{f}_a + \vec{r},$$

$$\vec{\phi}^0 = \vec{\phi}_a^0 + \vec{\xi}, \quad R_{\text{bound}}(\vec{\phi}) = \vec{g}_a + \vec{\varepsilon}, \quad \vec{Y} = \vec{Y}_a + \vec{\zeta}.$$

Данные измерений связаны с функцией состояния оператором наблюдений  $\mathbf{H}$

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

$\vec{\phi}$  - 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,  $\vec{\Psi}_m$  - данные наблюдений,

$\vec{r}$ ,  $\vec{\xi}$ ,  $\vec{\varepsilon}$ ,  $\vec{\zeta}$ ,  $\vec{\eta}$  - функции управления, которые вводятся в жесткую структуру модели для усвоения данных.



## Аддитивно-усреднённая схема расщепления

На временном интервале  $t^j \leq t \leq t^{j+1}$  рассмотрим аддитивно-усреднённую схему расщепления (аналогично [Самарский, Вабишевич, 2003]), для разбиения  $\sum_{\alpha=1}^2 \gamma_{\alpha} + \gamma = 1$ .

- Процессы конвекции-диффузии

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

- Процессы реакции

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

- Аппроксимация следующего шага

$$\vec{\phi} = \sum_{\alpha=1}^2 \gamma_{\alpha} \vec{\phi}_{\alpha} + \gamma_c \vec{\phi}_c.$$



# 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. Для этого используются

- Конечно-разностная схема (схема направленных разностей).
- Дискретно-аналитическая схема.

которые приводят к трехдиагональным матричным системам

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



## Усвоение данных и Тихоновская регуляризация

- Рассмотрим следующую задачу условной оптимизации

$$J(\phi^{j+1}, r^{j+1}) = \|H\phi^{j+1} - \Psi\|^2 + \alpha \|r^{j+1}\|^2.$$

относительно ограничения - **линейной аппроксимации модели**

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

- Вводя множители Лагранжа  $\phi^{j+1*}$ , стационарную точку расширенного функционала можно представить в виде

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

- Решение  $\phi^{j+1}$  системы также является решением

$$(H^*H + \alpha L^*L)\phi^{j+1} = H^*\Psi + \alpha L^*(\phi^j + \tau f^{j+1})$$

и минимумом целевого функционала

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



## Усвоение данных и Тихоновская регуляризация

Обозначим минимум функционала  $J(\phi^{j+1})$  через  $\phi^{j+1}(\alpha)$ .

$$\beta(\alpha) := \|H\phi^{j+1}(\alpha) - \Psi\|^2, \quad \xi(\alpha) := \|L\phi^{j+1}(\alpha) - (\phi^j + \tau f^{j+1})\|^2,$$

$$\Phi(\alpha) := J(\phi^{j+1}(\alpha)) = \beta(\alpha) + \alpha\xi(\alpha).$$

**Теорема** (Аналогично [Тихонов, Гончарский, Степанов, Ягола, 1990])

Пусть  $H, L$  - матрицы, причём  $L$  обратима

- Если увеличиваем "вес" модели, то решение "притягивается к траектории модели" и устойчивость решения увеличивается:

$$\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \xi(\alpha) = 0,$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \Phi(\alpha) = \lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \beta(\alpha) = \|HL^{-1}(\phi^j + \tau f^{j+1}) - \Psi\|^2.$$

- Если уменьшаем "вес" модели, то данные (и шум в них) "воспроизводятся" точнее :

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0+0} \alpha\xi(\alpha) = 0, \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0+0} \Phi(\alpha) = \lim_{\alpha \rightarrow 0+0} \beta(\alpha) = 0.$$



## Выбор параметра усвоения по принципу невязки

- Функции непрерывны при  $\alpha > 0$
- Функция  $\Phi(\alpha)$  выпукла и дифференцируема  $\Phi'(\alpha) = \xi(\alpha)$ .
- Функция  $\xi(\alpha)$  монотонно не возрастает и функции  $\Phi(\alpha), \beta(\alpha)$  монотонно не убывают при  $\alpha > 0$ . На интервале  $(0, \alpha_0)$  при  $Lq(\alpha) \neq f$  функции  $\Phi(\alpha)$  строго монотонны.

поэтому

- Выберем целевой уровень невязки  $\delta_*$ .

$$\|H\phi^{j+1} - \psi^{j+1}\| = \delta_*.$$

- Параметр усвоения вычисляется следующим алгоритмом

$$\alpha_1 = 1,$$

$$\alpha_{k+1} := \frac{\delta_*}{\|H\phi^{j+1} - \psi^{j+1}\|} \alpha_k.$$





## 3DVAR "Неявная" схема (weak constraints)

"Неявная" схема (weak constraints)

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

функционал Тихонова

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

- Оператор прямой задачи в регуляризаторе уменьшает "шоковые" эффекты от включения данных в модель.
- Требуется решать систему прямой и сопряжённой задач (сгенерировать которую для "готовых" моделей может быть сложно).



## Решение задачи усвоения данных

Для случая **контактных измерений** можно ввести маску системы измерений  $M_i^{j+1}$  равную 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  $\sigma_i$  - стандартные отклонения ошибок измерительного устройства.

Вводя множители Лагранжа (сопряженные функции):

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



## Матричная система

Систему прямой и сопряжённой задачи можно объединить в матричное уравнение

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

где

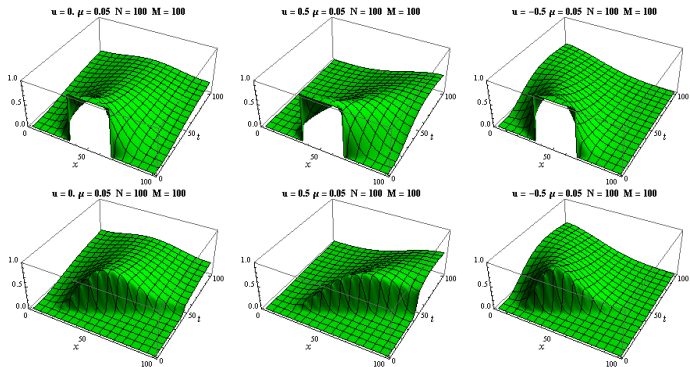
$$A_i = \begin{pmatrix} a_i & 0 \\ 0 & c_{i+1} \end{pmatrix}, \quad B_i = \begin{pmatrix} b_i & -\tau \\ \frac{M_i \tau}{\alpha \sigma_i^2} & b_i \end{pmatrix}, \quad C_i = \begin{pmatrix} c_i & 0 \\ 0 & a_{i-1} \end{pmatrix},$$

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

которое **решается методом матричной прогонки.**



# Сценарии усвоения данных (X,T) с подвижными измерителями



**Рис. 1:** Результат усвоения данных от подвижного измерителя для различных направлений "ветра". Точные решения (сверху), решения усвоенные в модель с нулевыми данными (снизу) [диплом Айнура Куссаиновой, 2013].



# Сценарии усвоения данных (X,T) с фиксированными измерителями

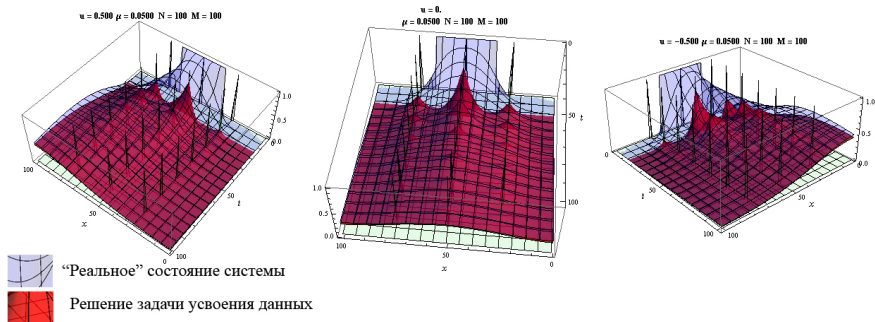


Рис. 2: Результат усвоения данных с фиксированными измерителями для различных направлений “ветра”. [диплом Айнур Куссаиновой, 2013].

# Явная дискретно-аналитическая схема для решения задачи химической кинетики

Для аппроксимации уравнений химической кинетики

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

Была использована дискретно-аналитическая схема

$$\phi_l^{j+1} = \phi_l^j e^{-P(\phi_l^j)\Delta t} + \frac{1 - e^{-P(\phi_l^j)\Delta t}}{P(\phi_l^j)\Delta t} \Pi(\phi_l^j)\Delta t.$$



# Модель химических реакций Робертсона

Рассмотрим оператор

$$S : \begin{matrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{matrix} \mapsto \begin{matrix} -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3 \\ 0.04y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2 \\ 3 \cdot 10^7 y_2^2 \end{matrix}$$

Система уравнений для модели химических реакций Робертсона

$$y' = S(y), \quad y(t) \in \mathbb{R}^3$$

$$y(0) = (1 \ 0 \ 0)^*$$

Система одномерной пространству конвекции-диффузии-реакции (система "Робертсона")

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(u\varphi - \mu \operatorname{grad} \varphi) = S(\varphi), \quad \varphi(t, x) \in \mathbb{R}^3.$$



# Усвоение данных для системы "Робертсона"

## Условия эксперимента

Система измерений:

Измеряется концентрация одной из субстанций в каждой 10ой точке сетки. Данные измерений точны.

Метеопараметры:

$$u = 2 \quad \mu = 50$$

Краевые условия:

Однородные условия Неймана

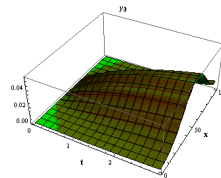
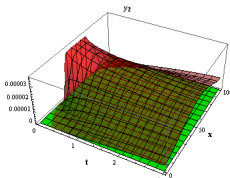
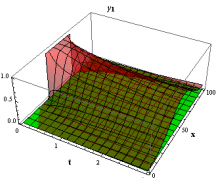
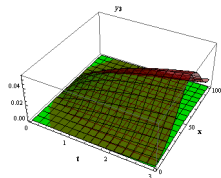
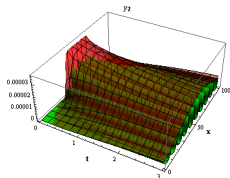
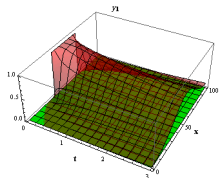
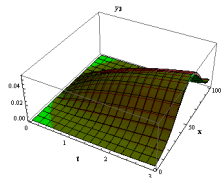
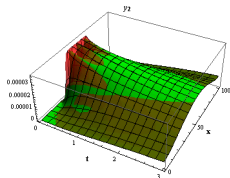
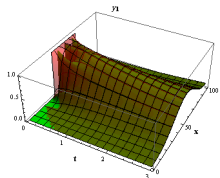
Параметры сеток:

$$\begin{aligned} n_T &= 4001 & T &= 3. \\ n_X &= 101 & X &= 100. \\ n_C &= 3 \end{aligned}$$





## Усвоение данных для системы "Робертсона"



# Параметр усвоения из статистических соображений

- Если предположить, что данные измерений - это точное решение в некотором наборе точек, возмущённое гауссовым шумом.

$$\Psi_m^j = \phi_{i(m)}^j + \sigma_m \xi_m, \quad \xi_m \sim N(0, 1),$$

- тогда с вероятностью  $q$ :

$$\delta_* = \sqrt{\sum_{m=1}^M \left( \frac{\Psi_m^j - \phi_{i(m)}^j}{\sigma_m} \right)^2} < \sqrt{\chi_{inv}^2(M, p)},$$

где  $\chi_{inv}^2(M, p)$  - решение уравнения

$$P(\chi_N^2 < \chi_{inv}^2(M, p)) = p.$$

- Параметром усвоения становится вероятность  $p$  "получить" в качестве оценки ошибки её оценку сверху.



# Параметр усвоения при "малых ошибках"

## Условия эксперимента

### Система измерений

$m$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$iX_m$	33	33	67	67	25	25	75	75	40	60	40	60
$iY_m$	33	67	33	67	25	75	25	75	60	40	40	60
$\sigma_m$	0.1	1.	0.5	1.	1.	2.	1.	0.5	1.	0.5	3.	0.1

### Метеопараметры

$$u = 0.1 \quad v = 0.1 \quad \mu = 0.1$$

### Параметры сеток

$$nT = 100 \quad T = 1.$$

$$nX = 100 \quad X = 1.$$

$$nY = 100 \quad Y = 1.$$



## Сценарий по отслеживанию последствий взрыва (X,Y,T)

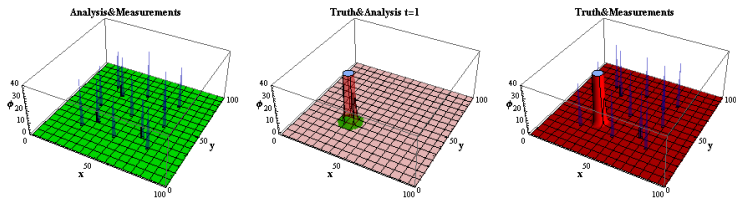


Рис. 4: Сценарий усвоения данных с 12ю регулярно расположенными измерительными инструментами для модели с нулевыми источниками. Усвоенное решение - зеленое с точками измерений - голубым (слева). "точное решение" - красное с точками измерений - голубым (справа) и суперпозиция точного и усвоенного решения (центр).



## Сценарий по отслеживанию последствий взрыва (X,Y,T)

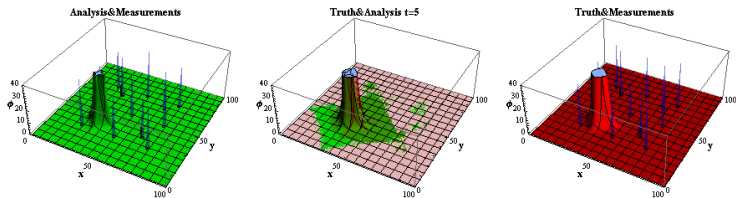


Рис. 4: Сценарий усвоения данных с 12ю регулярно расположенными измерительными инструментами для модели с нулевыми источниками. Усвоенное решение - зеленое с точками измерений - голубым (слева). "точное решение" - красное с точками измерений - голубым (справа) и суперпозиция точного и усвоенного решения (центр).



## Сценарий по отслеживанию последствий взрыва (X,Y,T)

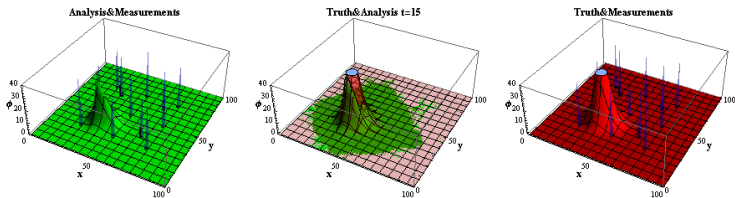


Рис. 4: Сценарий усвоения данных с 12ю регулярно расположенными измерительными инструментами для модели с нулевыми источниками. Усвоенное решение - зеленое с точками измерений - голубым (слева). "точное решение" - красное с точками измерений - голубым (справа) и суперпозиция точного и усвоенного решения (центр).



## Сценарий по отслеживанию последствий взрыва (X,Y,T)

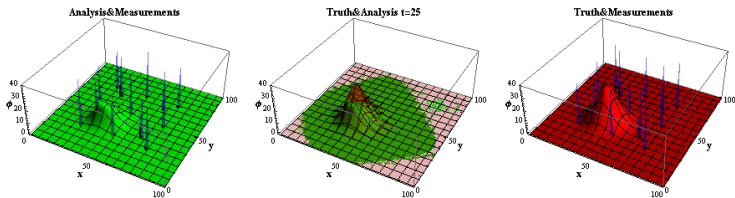


Рис. 4: Сценарий усвоения данных с 12ю регулярно расположенными измерительными инструментами для модели с нулевыми источниками. Усвоенное решение - зеленое с точками измерений - голубым (слева). "точное решение" - красное с точками измерений - голубым (справа) и суперпозиция точного и усвоенного решения (центр).



## Сценарий по отслеживанию последствий взрыва (X,Y,T)

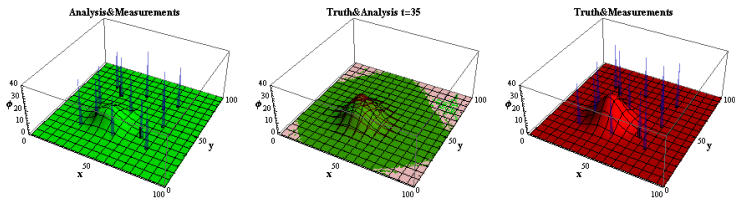


Рис. 4: Сценарий усвоения данных с 12ю регулярно расположенными измерительными инструментами для модели с нулевыми источниками. Усвоенное решение - зеленое с точками измерений - голубым (слева). "точное решение" - красное с точками измерений - голубым (справа) и суперпозиция точного и усвоенного решения (центр).





# Параметр усвоения при "малых ошибках"

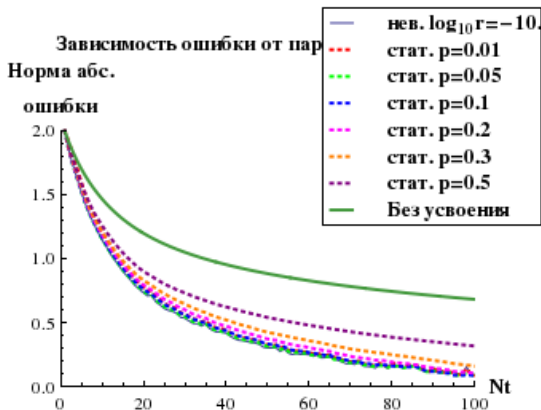


Рис. 5: Зависимость ошибки решения от параметра усвоения на "малых ошибках".



# Параметр усвоения при "больших ошибках"

Система измерений

$m$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$iX_m$	33	33	67	67	25	25	75	75	40	60	40	60
$iY_m$	33	67	33	67	25	75	25	75	60	40	40	60
$\sigma_m$	0.5	5.	2.5	5.	5.	10.	5.	2.5	5.	2.5	15.	0.5

Метеопараметры

$$u = 0.1 \quad v = 0.1 \quad \mu = 0.1$$

Параметры сеток

$$nT = 100 \quad T = 1.$$

$$nX = 100 \quad X = 1.$$

$$nY = 100 \quad Y = 1.$$



# Параметр усвоения при "больших ошибках"

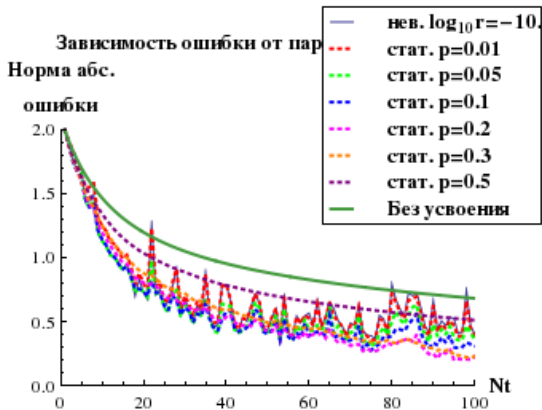


Рис. 6: Зависимость ошибки решения от параметра усвоения на "больших ошибках".



# Система измерений при "малых ошибках"

## Система измерений

$m$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$iX_m$	33	33	67	67	25	25	75	75	40	60	40	60
$iY_m$	33	67	33	67	25	75	25	75	60	40	40	60
$\sigma_m$	0.1	1.	0.5	1.	1.	2.	1.	0.5	1.	0.5	3.	0.1

## Параметры усвоения

$$\log_{10} r = -10. \quad p = 0.3$$

## Метеопараметры

$$u = 0.1 \quad v = 0.1 \quad \mu = 0.1$$

## Параметры сеток

$$nT = 100 \quad T = 1.$$

$$nX = 100 \quad X = 1.$$

$$nY = 100 \quad Y = 1.$$



# Система измерений при "малых ошибках"

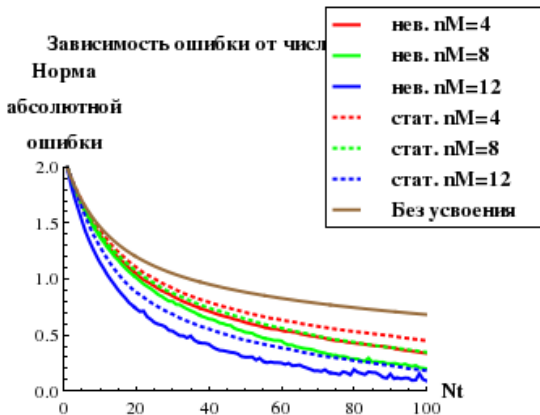


Рис. 7: Зависимость ошибки решения от числа постов наблюдений при "малых ошибках". Чем больше постов наблюдений, тем точнее.

# Система измерений при "больших ошибках"

## Система измерений

$m$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$iX_m$	33	33	67	67	25	25	75	75	40	60	40	60
$iY_m$	33	67	33	67	25	75	25	75	60	40	40	60
$\sigma_m$	0.7	7.	3.5	7.	7.	14.	7.	3.5	7.	3.5	21.	0.7

## Параметры усвоения

$$\log_{10} r = -10. \quad p = 0.3$$

## Метеопараметры

$$u = 0.1 \quad v = 0.1 \quad \mu = 0.1$$

## Параметры сеток

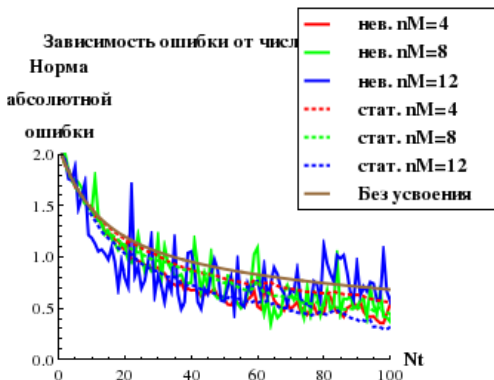
$$nT = 100 \quad T = 1.$$

$$nX = 100 \quad X = 1.$$

$$nY = 100 \quad Y = 1.$$



# Система измерений при "больших ошибках"



**Рис. 8:** Зависимость ошибки решения от числа постов наблюдений на "больших ошибках". Увеличение количества измерений улучшает "регуляризованное" решение.



# Заклучение

- Комбинирование схем расщепления и схем усвоения данных позволяет получать вычислительно эффективные алгоритмы для задач усвоения данных контактных измерений в модели конвекции-диффузии-реакции.
- Задачи усвоения данных решаются в условиях неполной информации. Недостаток информации восполняется математическими моделями (естественными Тихоновскими регуляризаторами).
- Работоспособность разработанных алгоритмов подтверждается численными экспериментами.









# Благодарности

## Благодарю за внимание!

Работа частично поддержана Программой № 4 Президиума РАН и № 3 ОММ РАН, грантом РФФИ 11-01-00187, интеграционными проектами СО РАН № 8 и 35.







## Список литературы I

-  V. Penenko, N. Obraztsov, *A variational initialization method for the fields of meteorological elements*, Soviet Meteor and Hydr N 1, (1976) 1-11.
-  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
-  Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. «Численные методы решения некорректных задач» (1990)
-  Freitag, M. and Potthast, R.: Synergy of Inverse Problems and Data Assimilation Techniques in “Large Scale Inverse Problems - Computational Methods and Applications in the Earth Sciences”, Radon Series on Computational and Applied Mathematics 13, Hrsg. v. Cullen, Mike / Freitag, Melina A / Kindermann, Stefan / Scheichl, Robert <http://www.degruyter.com/view/product/182025>





## Список литературы II

-  Africa Perianez, Hendrik Reich, Roland Potthast: Error Analysis and Adaptive Localization for Ensemble Methods in Data Assimilation, submitted for publication.
-  Самарский А.А., Вабищевич П.Н. «Вычислительная теплопередача», М.: Едиториал УРСС, (2003)
-  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.
-  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



## Список литературы III

-  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*, 2013, V 2, No 3 (in press)



# Основные подходы к усвоению данных

- Динамико-стохастический (оценка параметров статистических моделей) [Ghil, Malanotte-Rizzoli, 1991] и др.
  - Фильтры типа Калмана (по данным измерений оцениваются параметры нормальных распределений).
  - Фильтры частиц (по данным измерений взвешиваются элементы ансамбля решений).
- Вариационные (решение задачи усвоения разыскивается как минимум некоторого целевого функционала) [В.В.Пененко, Образцов, 1976], [Le Dimet, Talagrand, 1986], [Talagrand, Courtirer, 1987], [Rabier et al., 2001] и др.
  - 3D-4DVAR (ширина окна усвоения).
  - Следование траектории (strong/weak-constrained).
  - ...
- Гибридные подходы EnVar и т.д.



## 3DVAR Схемы включения данных наблюдений в модели

- "Неявная" схема (weak constraints)

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

функционал Тихонова

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

- "Явная" схема (strong constraints)

$$L\tilde{\phi}^{j+1} = \phi^j + \tau f^{j+1},$$

$$\phi^{j+1} = \tilde{\phi}^{j+1} + K(H\tilde{\phi}^{j+1} - \Psi),$$

функционал Тихонова [Perianez, Reich, Potthast, 2013]

$$J(\phi^{j+1}) = \|H(\phi^{j+1} - \tilde{\phi}^{j+1}) + H\tilde{\phi}^{j+1} - \Psi\|^2 + \alpha \|\phi^{j+1} - \tilde{\phi}^{j+1}\|^2$$



## 3DVAR "Явная" схема (strong constraints)

"Явная" схема (strong constraints)

$$L\tilde{\phi}^{j+1} = \phi^j + \tau f^{j+1},$$

$$\phi^{j+1} = \tilde{\phi}^{j+1} + K \left( H\tilde{\phi}^{j+1} - \Psi \right),$$

функционал Тихонова [Perianez, Reich, Potthast, 2013]

$$J(\phi^{j+1}) = \left\| H(\phi^{j+1} - \tilde{\phi}^{j+1}) + H\tilde{\phi}^{j+1} - \Psi \right\|^2 + \alpha \left\| \phi^{j+1} - \tilde{\phi}^{j+1} \right\|_K^2.$$

- Норму в регуляризаторе нужно выбрать в соответствии с пространственной структурой решения (например, с применением ансамблевых методов с запуском большого числа прямых задач).
- Достаточно "уметь" решать задачу прямого моделирования (готовыми программами).



# Явная дискретно-аналитическая схема для решения задачи химической кинетики

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

Домножив на интервале  $t_j \leq t \leq t_{j+1}$  на сопряженную  $\phi^*$  и проинтегрировав по частям, получим тождество, верное для всех  $\phi^*$

$$\begin{aligned} \phi(t_{j+1})\phi^*(t_{j+1}) - \phi(t_j)\phi^*(t_j) + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \phi \left[ -\frac{\partial \phi^*}{\partial t} + P(\phi)\phi^* \right] dt - \\ - \int_{t_j}^{t_{j+1}} \Pi(\phi)\phi^* dt = 0. \end{aligned}$$

Если выбрать  $\phi^*$  как решение

$$-\frac{\partial \phi^*}{\partial t} + P(\phi)\phi^* = 0, \quad \phi^*(t_{j+1}) = 1,$$





# Явная дискретно-аналитическая схема для решения задачи химической кинетики

Тогда

$$\phi^{j+1} = \phi^j \phi^{*j} + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \Pi(\phi) \phi^* dt$$

Если аппроксимировать  $\phi^*$  решением системы с постоянным коэффициентом, то

$$\phi^{j+1} = \phi^j e^{-P(\phi^j)\Delta t} + \int_{t_j}^{t_{j+1}} \Pi(\phi) e^{-P(\phi^j)(\Delta t-t)} dt$$

После аппроксимации интегрального слагаемого

$$\phi^{j+1} = \phi^j e^{-P(\phi^j)\Delta t} + \frac{1 - e^{-P(\phi^j)\Delta t}}{P(\phi^j)\Delta t} \Pi(\phi^j)\Delta t.$$



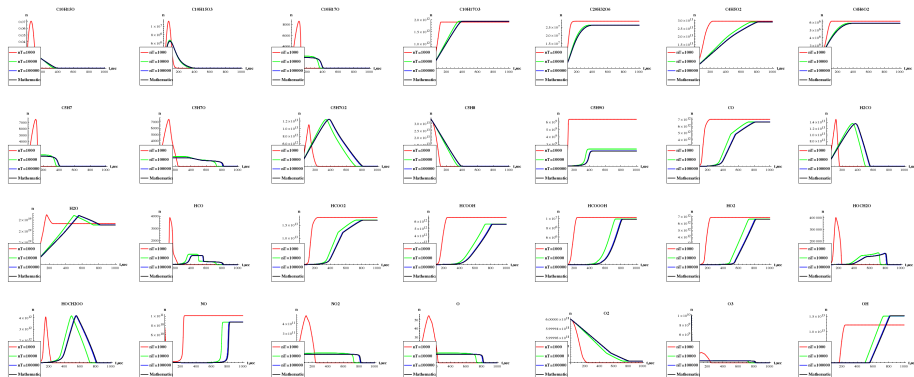
# Исследование сходимости для одной задачи химии аэрозолей

$$\begin{aligned}
 C10H15O_0'(t) &= C5H7O_0(t)C5H8(t)k[9] - C10H15O_0(t)O_02(t)k[10] \\
 C10H15O_03'(t) &= C10H15O_0(t)O_02(t)k[10] - C10H15O_03(t)C10H17O_03(t)k[13] \\
 C10H17O_0'(t) &= C5H8(t)C5H9O_0(t)k[11] - C10H17O_0(t)O_02(t)k[12] \\
 C10H17O_03'(t) &= C10H17O_0(t)O_02(t)k[12] - C10H15O_03(t)C10H17O_03(t)k[13] \\
 C20H32O_06'(t) &= C10H15O_03(t)C10H17O_03(t)k[13] \\
 C4H5O_02'(t) &= C5H7O_0(t)O_02(t)k[15] \\
 C4H6O_02'(t) &= C5H8(t)O_03(t)k[14] \\
 C5H7'(t) &= C5H8(t)O_0H(t)k[6] - C5H7(t)O_02(t)k[7] \\
 C5H7O_0'(t) &= C5H7O_02(t)NO_0(t)k[8] - C5H7O_0(t)C5H8(t)k[9] - C5H7O_0(t)O_02(t)k[15] \\
 C5H7O_02'(t) &= C5H7(t)O_02(t)k[7] - C5H7O_02(t)NO_0(t)k[8] \\
 C5H8'(t) &= -C5H8(t)O_0H(t)k[5] - C5H8(t)O_0H(t)k[6] - C5H7O_0(t)C5H8(t)k[9] - C5H8(t)C5H9O_0(t)k[11] - C5H8(t)O_03(t)k[14] \\
 C5H9O_0'(t) &= C5H8(t)O_0H(t)k[5] - C5H8(t)C5H9O_0(t)k[11] \\
 CO_0'(t) &= HCO_0(t)O_02(t)k[18] \\
 H2CO_0'(t) &= C5H8(t)O_03(t)k[14] + C5H7O_0(t)O_02(t)k[15] - H2CO_0(t)O_0H(t)k[16] - H2CO_0(t)HO_02(t)k[20] \\
 H2O_0'(t) &= -H2O_0(t)O_0(t)k[4] + C5H8(t)O_0H(t)k[6] + H2CO_0(t)O_0H(t)k[16] \\
 HCO_0'(t) &= H2CO_0(t)O_0H(t)k[16] - HCO_0(t)O_02(t)k[17] - HCO_0(t)O_02(t)k[18] - HCO_0(t)HO_02(t)k[19] \\
 HCO_0O_02'(t) &= HCO_0(t)O_02(t)k[17] \\
 HCO_0O_0H'(t) &= HCO_0(t)O_02(t)k[17] \\
 HCO_0O_0O_0H'(t) &= HCO_0(t)HO_02(t)k[19] \\
 HO_02'(t) &= HCO_0(t)O_02(t)k[18] - HCO_0(t)HO_02(t)k[19] - H2CO_0(t)HO_02(t)k[20] + HO_0CH2O_0(t)O_02(t)k[22] \\
 HO_0CH2O_0'(t) &= HO_0CH2O_0(t)NO_0(t)k[21] - HO_0CH2O_0(t)O_02(t)k[22] \\
 HO_0CH2O_0O_0'(t) &= H2CO_0(t)HO_02(t)k[20] - HO_0CH2O_0(t)NO_0(t)k[21] \\
 NO_0'(t) &= NO_02(t)k[1] - C5H7O_02(t)NO_0(t)k[8] - HO_0CH2O_0(t)NO_0(t)k[21] \\
 NO_02'(t) &= -NO_02(t)k[1] + C5H7O_02(t)NO_0(t)k[8] + HO_0CH2O_0(t)NO_0(t)k[21] \\
 O_0'(t) &= NO_02(t)k[1] - O_0(t)O_02(t)k[2] + O_03(t)k[3] - H2O_0(t)O_0(t)k[4] \\
 O_02'(t) &= -O_0(t)O_02(t)k[2] + O_03(t)k[3] - C5H7(t)O_02(t)k[7] - C10H15O_0(t)O_02(t)k[10] - C10H17O_0(t)O_02(t)k[12] - C5H7O_0(t)O_02(t)k[15] - HCO_0(t)O_02(t)k[17] - HCO_0(t)O_02(t)k[18] - HO_0CH2O_0(t)O_02(t)k[22] \\
 O_03'(t) &= O_0(t)O_02(t)k[2] - O_03(t)k[3] - C5H8(t)O_03(t)k[14] \\
 O_0H'(t) &= 2.H2O_0(t)O_0(t)k[4] - C5H8(t)O_0H(t)k[5] - C5H8(t)O_0H(t)k[6] - H2CO_0(t)O_0H(t)k[16] \\
 H2O_0(0) &= 2. \times 10^{19} \\
 NO_02(0) &= 8. \times 10^{10} \\
 NO_0(0) &= 7. \times 10^6 \\
 C5H8(0) &= 3.3 \times 10^{13} \\
 O_02(0) &= 6. \times 10^{18} \\
 O_03(0) &= 1. \times 10^{10}
 \end{aligned}$$

Подготовлено Дульцевой Г.Г. ИХКиГ СО РАН Проект 35 СО РАН



# Численное исследование сходимости



**Рис. 4:** Исследование сходимости в зависимости от числа точек сетки.  $T = 1000$  sec.  $N_t=1e+3$  (Красный),  $1e+4$  (Зеленый),  $1e+5$  (Голубой), Wolfram Research Mathematica 9 ODE Solver (Черный).

