Пененко Алексей Владимирович. Математическое моделирование процессов адвекции-диффузии-реакции с усвоением данных наблюдений и решением обратных задач;[Место защиты: ФГБУН Институт математики им. С.Л. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук], 2021

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт

вычислительной математики и математической геофизики Сибирского

отделения Российской академии наук

На правах рукописи

Пененко Алексей Владимирович

Математическое моделирование процессов

адвекции-диффузии-реакции с усвоением

данных наблюдений и решением обратных задач

05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы

программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Новосибирск - 2021

Оглавление

Введение 4

Глава 1. Постановка задач прямого и обратного моделирования 13

1.1. Введение 13

1.2. Постановка прямой задачи 18

1.3. Задачи оценки чувствительности 24

1.4. Постановка задач обратного моделирования 33

1.5. Краткие выводы по Главе 51

Глава 2. Согласованные численные схемы для задач обратного моделирования 52

2.1. Введение 52

2.2. Аддитивно-усредненная схема расщепления 55

2.3. Численные схемы для процессов адвекции-диффузии 58

2.4. Численные схемы для процессов трансформации 72

2.5. Постановка дискретной прямой задачи 78

2.6. Согласованные численные схемы для процессов адвекции-диф-

фузии-реакции 81

2.7. Постановка дискретной обратной задачи 88

2.8. Постановка задач усвоения данных 89

2.9. Краткие выводы по Главе 90

Глава 3. Вариационные алгоритмы 91

3.1. Введение 91

3.2. Градиенты функционалов невязки 93

3.3. Вариационное усвоение данных 97

3.4. «Неявный» 3DVAR 99

3.5. Усвоение данных на отдельных стадиях схемы расщепления ... 116

3.6. Композитный алгоритм 131

3.7. Выбор параметра регуляризации по методу модельного решения 142

3.8. Краткие выводы по Главе 152

Глава 4. Алгоритмы на основе квазилинейных операторных урав¬нений с операторами чувствительности 155

4.1. Введение 155

4.2. Построение оператора чувствительности 158

4.3. Алгоритмы типа Ньютона-Канторовича решения квазилинейных

операторных уравнений 166

4.4. Примеры численного решения задач обратного моделирования . 171

4.5. Краткие выводы по Главе 211

Глава 5. Комплекс программ IMDAF 213

5.1. Введение 213

5.2. Основные объекты системы IMDAF 213

5.3. Параллельные вычисления и использование памяти 217

5.4. Форматы и внешние данные 223

5.5. Геофизические приложения 225

5.6. Решаемые системой прикладные задачи 226

5.7. Краткие выводы по Главе 227

Заключение 228

Список литературы 238

Список иллюстративного материала 275

Приложение А. Модели химической кинетики 282

А.1. Модель химии атмосферы из 20 реакций 282

А.2. Модель RADM2 284

Приложение Б. Вспомогательные алгоритмы 286

Б.1. Оптимизационные алгоритмы 286

Б.2. Алгоритм матричной прогонки 287

Приложение В. Свидетельство о регистрации

программы для ЭВМ 289

Заключение

Актуальность данной работы подтверждается разнообразием приложений для задач математического моделирования процессов адвекции-диффузии-реак- ции, в том числе в области охраны окружающей среды и в различных био­медицинских приложениях. При этом важно принимать во внимание не только имеющиеся математические модели, но и реально доступные для изучаемых объектов и процессов данные измерений, то есть разрабатывать методы мате­матического моделирования на основе совместного использования моделей и данных наблюдений (для краткости в работе используется термин «обратное моделирование» или «inverse modeling» на английском). В том числе методы решения обратных задач и задач усвоения данных.

Измерения могут проводиться различными инструментами и системами, поэтому для учета их результатов в алгоритмах важно обеспечить единооб­разный подход к различным типам данных измерений. Для того, чтобы раз­рабатываемые алгоритмы можно было эффективно реализовать на современ­ных ЭВМ, их структура должна допускать естественное распараллеливание. Таким требованиям удовлетворяют ансамблевые алгоритмы и схемы расщепле­ния. Безусловно, работая на перспективу, необходимо опираться на имеющиеся достижения и современные подходы в теории и методах вычислительной ма­тематики и математического моделирования в области решения обратных и некорректных задач и, конкретно, в части решения и исследования некоррект­ных операторных уравнений.

На основе этих соображений была поставлена цель: разработать и реали­зовать общий подход к численному решению и исследованию обратных задач и задач усвоения данных для моделей адвекции-диффузии-реакции с линейными операторами измерений на основе алгоритмов ансамблевого типа. Поскольку одним из основных приложений результатов работы предполагалось решение задач охраны окружающей среды, необходимо было принять во внимание та­кие аспекты, как [[1]](#footnote-1)

метры моделей, да и сама структура моделей;

* небольшое, относительно размерностей моделей, количество доступных данных измерений;
* необходимость получать и уточнять оценки и прогнозы по мере поступ­ления новых данных, т.е. имеются существенные ограничения как на вы­числительные ресурсы, так и на время вычислений. Задачи должны быть решены до того, как они потеряют свою актуальность.

Для постановки задач совместного использования моделей и данных на­блюдений рассматривались следующие основные объекты:

* Модели процессов, которые связывают основные переменные и парамет­ры задачи. Рассматриваются нестационарные многокомпонентные модели адвекции-диффузии-реакции различной пространственной размерности и с различным количеством реагирующих компонентов. Процессы реакции представлены двумя составляющими: продукцией и деструкцией.
* Модели измерений, которые связывают данные измерений с переменны­ми моделей процессов. Рассматривались линейные операторы измерений. Ключевым вопросом при задании оператора измерений являются набор измеряемых компонентов функции состояния модели процессов, а также пространственная локализация измерений. В работе рассматривались ло­кализованные в пространстве и времени данные измерений.
* Параметры моделей условно делятся на известные (заданные) и на функ­ции неопределенностей, за счет модификации которых решаются задачи обратного моделирования. В работе представлены примеры выбора в ка­честве неопределенностей функции источников и коэффициентов диффу­зии.
* Искомые или оцениваемые элементы моделей, которые не обязательно сов­падают с функциями неопределенности. В частности, это могут быть нена­блюдаемые элементы функции состояния моделей.

Базовыми теоретическими конструкциями, на которых строятся разраба­тываемые в работе методы и алгоритмы, является соотношение чувствитель­ности и сопряженные уравнения. Они позволяют связать вариацию функции состояния модели с вариацией функции неопределенности задачи. В соотноше­нии чувствительности вариация функции состояния взвешивается с некоторым произвольным весом, обычно определяемым оператором измерений, а вариация функции состояния взвешивается с функцией чувствительности. Функция чув­ствительности обычно является агрегатом решения прямой задачи и решения линейного сопряженного уравнения, структура которого определяется моделью процессов, а источники - весом при вариации функции состояния. Таким обра­зом, выбор модели определяет вид сопряженного уравнения, выбор функции неопределенности задает вид функции чувствительности, а выбор типа данных измерений функции состояния модели определяет расположения источников в сопряженном уравнении. При этом сохраняется общий вид соотношений чув­ствительности, что и обеспечивает универсальность его применения для реше­ния различных обратных задач. В частности, соотношения чувствительности и сопряженные задачи часто применяются для вычисления градиентов функцио­налов невязки при решении обратных задач и задач усвоения данных оптимиза­ционными (вариационными) алгоритмами. Стоит заметить, что итерационные градиентные алгоритмы, типа метода сопряженных градиентов, довольно слож­но распараллелить.

Соотношение чувствительности может также использоваться для постро­ения оператора чувствительности. Для этого задается набор функций проек­тирования данных измерений (весов для вариации функции состояния в соот­ношении чувствительности) и для каждой такой функции решается сопряжен­ное уравнение. Все такие сопряженные уравнения можно решать независимо (параллельно), поэтому для обозначения этого множества используется термин «ансамбль решений сопряженных уравнений». Оператор чувствительности фор­мируется из соответствующего набора функций чувствительности.

Если количество элементов данных измерений относительно мало, и каж­дому из них можно сопоставить некоторую весовую функцию так, чтобы вариа­ция соответствующего модельного элемента измерений получалась как скаляр­ное произведение вариации функции состояния модели на весовую функцию, то оператор чувствительности можно составить из всех таких функций чувстви­тельности. Классическим примером являются данные небольшого количества контактных измерений.

Основное внимание в работе уделено случаю, когда данных измерений на­столько «много», что имеющихся вычислительных ресурсов недостаточно для решения ансамбля сопряженных уравнений для каждого элемента данных в «отведенное для решения задачи время». Примером являются «данные типа изображений», в том числе снимки значений функции состояния высокого раз­решения, или временные ряды значений функции состояния модели. В этом случае определяется некоторый оператор «извлечения структуры», который из всего объема данных выделяет некоторые «характерные особенности», для ко­торых и строится оператор чувствительности. В работе оператор «извлечения структуры» строится на основе проектирования данных измерений на некото­рую систему функций. Кроме контроля размерности оператора чувствительно­сти и, соответственно, требуемого для его построения объема вычислений, такой подход позволяет осуществлять «препроцессинг» данных. Например, «отфиль­тровать» шум.

С помощью оператора чувствительности для любой системы проектирова­ния можно записать квазилинейное операторное уравнение, множество решений которого содержит множество решений исходной обратной задачи. Увеличивая количество функций проектирования можно сужать множество решений. К та­кому виду можно приводить широкий спектр обратных задач, в которых моде­ли процессов и измерений допускают соотношение чувствительности. В работе рассматриваются модели типа адвекции-диффузии-реакции и линейные опера­торы измерений, а в качестве направления будущей работы можно обозначить обобщение подхода на нелинейные операторы измерений и на модели процессов других типов, например волновых. В работе рассматриваются локализованные данные измерений, но подход можно естественно перенести на данные инте­грального типа по времени и пространству. Можно продолжать исследования в направлении других функций неопределенности. Так, автор развивает подход на задаче идентификации параметров операторов продукции-деструкции.

Важным вопросом при реализации предлагаемого подхода к моделирова­нию является выбор системы функций проектирования. С одной стороны, она должна «достаточно точно» описывать имеющийся набор данных измерений, а с другой - быть «не очень большой». При ее построении сначала определя­ется некоторый базовый набор, например, соответствующий косинус-базис. В качестве направлений дальнейших исследований можно исследовать эффектив­ность использования других способов задания базового набора.

1. нелинейность, разнообразие временных масштабов и процессов, высокая (до 1012) размерность моделей;

	* высокая неопределенность, в том числе неизвестные источники выбросов, начальные и краевые условия, скорости трансформаций и другие пара- [↑](#footnote-ref-1)