

РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМОВ НА ОСНОВЕ АНСАМБЛЕЙ СОПРЯЖЕННЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ МОНИТОРИНГА

Алексей Владимирович Пененко

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник; Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2, научный сотрудник, тел. (383)330-61-52, e-mail: a.penenko@yandex.ru

На основе подхода с использованием ансамблей решений сопряжённых уравнений можно единообразным образом решать широкий спектр задач обратного моделирования с обработкой данных мониторинга различного типа, в том числе контактных данных измерений и данных типа изображений. Соответствующая программная система реализована в рамках объектно-ориентированного подхода. В статье приводится краткое описание основных компонентов системы, разработанной для решения обратных задач для моделей адвекции-диффузии-реакции. Такие задачи возникают, например, при исследовании процессов переноса и трансформации примесей в атмосфере и процессов развития живых систем.

Ключевые слова: объектно-ориентированный подход, модели переноса и трансформации примесей, обратная задача, сопряженные уравнения, оператор чувствительности.

IMPLEMENTATION OF ALGORITHMS BASED ON ENSEMBLES OF ADJOINT FUNCTIONS FOR PROCESSING MONITORING DATA

Alexey V. Penenko

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, 6, Prospect Akademik Lavrentiev St., Novosibirsk, 630090, Russia, PhD, Senior researcher, Novosibirsk national research state University, 2, Pirogova St., Novosibirsk, 630090, Russia, Researcher, phone: (383)330-61-52, e-mail: a.penenko@yandex.ru

On the basis of the approach with the use of ensembles of solutions of adjoint equations, it is possible to solve a wide range of inverse modeling problems in a uniform way with the processing of monitoring data of various types, including in situ measurement data and image-type data. The corresponding computational system is implemented within the object-oriented approach. The article provides a brief description of the main components of the system developed for solving inverse problems for advection-diffusion-reaction models. Such problems arise, for example, when studying the processes of transport and transformation of impurities in the atmosphere and the processes of development of the living systems.

Key words: object-oriented approach, transport and transformation model, inverse problem, adjoint equations, sensitivity operator.

Введение

В цикле работ [1-6] разрабатывается подход к обратному моделированию на основе сведения обратной задачи, сформулированной в виде системы диф-

ференциальных уравнений, к семейству нелинейных операторных уравнений, зависящих от выбора базиса проектирования в пространстве данных измерений, с последующим его решением алгоритмами типа Ньютона-Канторовича. Актуальность подхода основывается на возможности параллельного вычисления оператора для формирования уравнения, а также на возможности использовать для его решения и исследования методов теории нелинейных некорректных операторных уравнений. Подход изучается на примере моделей адвекции-диффузии-реакции, которые применяются при моделировании химии атмосферы, а также в задачах биологии развития. Для того, чтобы использовать разработанные алгоритмы в практических приложениях, необходимо реализовать их в виде программной системы. Примеры описания архитектур для решения различных задач обратного моделирования можно найти в [7 - 8].

Целью данной работы является краткий обзор архитектуры системы обратного моделирования Inverse Modeling and Data Assimilation Framework (IMDAF) на основе ансамблей решений сопряженных уравнений для обработки различных данных мониторинга. При проектировании системы предусматривалась возможность решения задач в нескольких предметных областях для моделей различной сложности, с различными данными измерений, с возможностью быстрой замены конфигурации набора используемых алгоритмов.

Методы и материалы

Для примера рассмотрим прямоугольную пространственно-временную область: $(x, t) \in \Omega_T := \Omega \times [0, T]$, $\Omega = [0, X] \times [0, Y] \times [0, Z]$, ограниченную $\partial\Omega_T = \partial\Omega \times [0, T]$. В этой области решается задача о переносе и трансформации набора химических веществ:

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{u} \varphi_l - \mu \operatorname{grad} \varphi_l) + P_l(t, \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{y}) \varphi_l = \Pi_l(t, \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{y}) + f_l + r_l, \quad (x, t) \in \Omega_T. \quad (1)$$

$$\mu(x, t) \frac{\partial \varphi_l(x, t)}{\partial n} = 0, \quad (x, t) \in \Gamma_{out}, \quad \varphi_l(x, t) = (\varphi_b)_l(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma_{in}, \quad (2)$$

$$\varphi_l(x, t) = (\varphi_0)_l(x), \quad x \in D, \quad t = 0, \quad (3)$$

где $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbb{R}^{N_c}$ – вектор-функция состояния, различные элементы которой $\varphi_l, l = 1, \dots, N_c$ представляют концентрации рассматриваемых примесей, N_c – их количество, $P_l(t, \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{y}) > 0$ – коэффициенты деструкции рассматриваемых веществ, $\Pi_l(t, \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{y}) > 0$ – скорости продукции, \mathbf{y} – параметры операторов продукции-деструкции, $\vec{u}(x, t) \in \mathbb{R}^3$ – вектор скорости переноса, $\mu(z, t)$ – коэффициент диффузии, $f_l, (\varphi_0)_l$ – априорные значения источников и начальных данных, $(\varphi_b)_l$ – концентрация вещества на границе области, r_l – управляющая функция (неопределенность), которая добавляется в жесткую структуру модели для усвоения

данных, Γ_{out} - часть границы области, на которой скорость переноса вещества направлена наружу из области, Γ_{in} - часть границы, на которой скорость переноса направлена внутрь. Операторы продукции и деструкции задаются системой кинетических уравнений. Скорости фотохимических реакций зависят от времени суток. Прямая задача состоит в определении Φ из (1)-(3) по известным $f_i, (\varphi_0)_i, (\varphi_b)_i, r_i, y$.

В обратных задачах требуется по отдельной информации о функции состояния модели найти источники \mathbf{r} или коэффициенты y . Для обратной задачи строится оператор чувствительности и соответствующее квазилинейное операторное уравнение. Обратная задача определяется моделью, оператором измерений и выбором искомого функции неопределенностей. Для того, чтобы обеспечить необходимую для решения широкого спектра задач обратного моделирования гибкость системы, и сократить дублирование кода, был использован объектно-ориентированный подход.

Результаты

Так как решение обратной задачи зачастую занимает кратно больше времени, чем решения прямой задачи, для исследования различных процессов необходимо гибко управлять сложностью прямых задач. Поэтому вместо одной модели разрабатывается шкала моделей для различных пространственных размерностей и различных моделей трансформации примесей. Например, в [1] используется модель химии атмосферы, в [3] – модель Лоренца'63 [9], а в [5] – модель динамики морфогенов в растительной ткани. Эта группа объектов отвечает за согласованное решение прямых и сопряженных задач на уровне отдельных временных шагов.

Работа с обратными задачами проводится внутри соответствующих классов. Они хранят данные обратной задачи, реализуют операторы измерений и операторы, которые ставят в соответствие функциям неопределённости результаты измерений. Кроме того, они осуществляют параллельное вычисление ансамблей решений сопряжённых уравнений. Важнейшей диагностической функцией данных классов является проверка выполнения тождества типа Лагранжа, связывающее вариацию функции состояния модели с вариацией искомого параметров. Веса, которые при этом возникают, называются функциями чувствительности. При их вычислении используются решения прямых и сопряженных задач. Например, при решении обратной задачи поиска источников [1] функциями чувствительности являются сами решения сопряженных уравнений, а при решении обратной коэффициентной задачи – некоторые агрегаты из решений прямых и сопряжённых задач.

Основные вычисления проводятся в объекте, описывающем решатель (solver) для нелинейных операторных уравнений, реализующий как стандартные оптимизационные алгоритмы, так и разрабатываемый алгоритм типа Ньютона-Канторовича. Его объектами-потомками являются решатели для конкрет-

ных обратных задач с выбором конкретного метода решения. В этих классах-потомках осуществляется построение операторов чувствительности или градиентов целевых функционалов, которыми затем оперирует базовый класс-решатель. Через задание функций проектирования в них определяется, какая часть данных измерений будет использована для решения обратной задачи. Система позволяет работать как с точечными данными [3], так и с данными типа изображений [5], [4]. Это могут быть временные ряды концентраций некоторых химических веществ в «коробочных» (0-мерных) моделях [1] и с локализацией в пространстве, а также двумерные снимки полей концентраций в заданные моменты времени [5]. Кроме того, предусмотрена работа с временными рядами, содержащими двумерные изображения [2]. На уровне реализации это достигается за счет выбора системы функций проектирования.

В рамках разрабатываемого подхода, каждому элементу системы функции проектирования соответствует решение одной сопряженной задачи из ансамбля. Поэтому количество таких функций проектирования должно быть кратно количеству параллельных вычислительных потоков. В случае относительно небольшого количества точечных данных измерений, сопряженные задачи можно решать для каждого элемента данных. Для работы с данными типа изображений, когда количество пикселей изображения существенно больше, чем количество вычислительных потоков, требуется дополнительно строить систему проектирования. Например, использовать начальный отрезок косинус-базиса.

Для построения отдельных сценариев обратного моделирования, в том числе и сценариев оценки качества атмосферы в городе, используются вспомогательные классы. Они осуществляют ввод-вывод данных на основе формата netCDF. В систему, например, требуется передавать метеорологические поля скоростей ветра и коэффициентов диффузии, априорную информацию об источниках и данные измерений. Для задания конфигурации системы используются файлы в формате XML. Сохранение результатов моделирования также производится в формате netCDF.

Заключение

Архитектура разработанной системы IMDAF позволяет решать широкий спектр обратных задач для моделей адвекции-диффузии-реакции с данными типа изображений и данными точечных измерений концентрации. Объектно-ориентированный подход позволяет обеспечить необходимую гибкость разработки кода, ориентированного на исследовательские цели, и единообразный подход к решению различных прикладных задач.

Благодарности

Разработка и исследование алгоритмов для работы с данными типа изображений на основе операторов чувствительности выполнена при финансовой поддержке РФФИ №17-71-10184, алгоритмы для решения коэффициентных об-

ратных задач с данными контактных измерений разрабатываются и исследуются при поддержке РФФИ № 19-07-01135, построение городских сценариев для обратного моделирования поддержано проектом РФФИ № 17-01-00137.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Penenko A.V. (2019) A Newton–Kantorovich Method in Inverse Source Problems for Production-Destruction Models with Time Series-Type Measurement Data // *Numerical Analysis and Applications*, Vol. 12, 51-69.
2. Penenko A.V. (2018) Algorithms for the inverse modelling of transport and transformation of atmospheric pollutants // *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, Vol. 211, 012052.
3. Penenko A.V. (2018) Consistent Numerical Schemes for Solving Nonlinear Inverse Source Problems with Gradient-Type Algorithms and Newton-Kantorovich Methods // *Numerical Analysis and Applications*, Vol. 11, 73-88.
4. Penenko A., Penenko V., Tsvetova E., Mukatova Z. Consistent Discrete-Analytical Schemes for the Solution of the Inverse Source Problems for Atmospheric Chemistry Models with Image-Type Measurement Data // In: *Finite Difference Methods. Theory and Applications*. Springer International Publishing, 2019, 378-386.
5. Penenko A., Zubairova U., Mukatova Z., Nikolaev S. (2019) Numerical algorithm for morphogen synthesis region identification with indirect image-type measurement data // *Journal of Bioinformatics and Computational Biology*, Vol. 17, 1940002.
6. Пененко А. В., Николаев С. В., Голушко С. К., Ромащенко А. В., Кирилова И. А. Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии // *Мат. биол. и биоинф.* – 2016. – Т. 11, С. 426-444.
7. Nerger L., Hiller W. (2013) Software for ensemble-based data assimilation systems—Implementation strategies and scalability // *Computers & Geosciences*, Vol. 55, 110-118.
8. Ridler M.E., Velzen N., Hummel S., Sandholt I., Falk A.K., Heemink A., Madsen H. (2014) Data assimilation framework: Linking an open data assimilation library (OpenDA) to a widely adopted model interface (OpenMI) // *Environmental Modelling & Software*, Vol. 57, 76-89.
9. Lorenz E.N. (1963) Deterministic Nonperiodic Flow // *Journal of the Atmospheric Sciences*, Vol. 20. 130-141.

© А. В. Пененко, 2019