

УДК 517.988, 519.62

Метод Ньютона–Канторовича для решения обратных задач идентификации источников в моделях продукции–деструкции с данными типа временных рядов*

А.В. Пененко^{1,2}

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

²Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ), ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090

E-mail: a.penenko@yandex.ru

Пененко А.В. Метод Ньютона–Канторовича для решения обратных задач идентификации источников в моделях продукции–деструкции с данными типа временных рядов // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд.-ние. — Новосибирск, 2019. — Т. 22, № 1. — С. 57–79.

Рассмотрены алгоритмы решения обратной задачи идентификации источников для систем нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений продукции–деструкции с данными измерений в виде временных рядов. На основе сопряженных уравнений построен оператор чувствительности и его дискретный аналог, связывающий возмущения искомым параметров модели с возмущениями измеряемых величин. Этот оператор позволяет получить семейство квазилинейных операторных уравнений, связывающих искомые величины и данные обратной задачи. Для решения уравнений применяется алгоритм типа Ньютона–Канторовича с использованием правых r -псевдообратных матриц. Алгоритм применяется для решения обратной задачи идентификации источников для модели трансформации примесей в атмосфере.

DOI: 10.15372/SJNM20190105

Ключевые слова: обратная задача идентификации источников, большие данные, метод Ньютона–Канторовича, сопряженные уравнения, оператор чувствительности, r -псевдообратная матрица, правая обратная.

Penenko A.V. The Newton–Kantorovich method in inverse source problems for production–destruction models with time series-type measurement data // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2019. — Vol. 22, № 1. — P. 57–79.

The algorithms for solving the inverse source problem for the production–destruction type systems of nonlinear ordinary differential equations with measurement data in the form of time series are presented. The sensitivity operator and its discrete analogue on the basis of adjoint equations are constructed. This operator binds the perturbations in the unknown parameters of the model to those of the measured values. The operator allows one to construct a family of quasi-linear operator equations linking the required unknown parameters and the data of the inverse problem. The Newton–Kantorovich type method with right-hand side r -pseudoinverse matrices is used to solve the equations. The algorithm is applied to solving the inverse source problem for the atmospheric impurities transformation model.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда по проекту № 17-71-10184 (в части разработки алгоритмов и их исследовании). Векторизация и оптимизация программ для ЭВМ выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (4.1.3 совместные лаборатории НГУ-НИЦ СО РАН).

Keywords: *inverse source problem, big data, Newton–Kantorovich method, adjoint equations, sensitivity operator, r -pseudoinverse matrix, right inverse.*

1. Введение

Обратные задачи идентификации источников для нелинейных динамических моделей возникают в приложениях как непосредственно, так и при решении задач усвоения данных, когда параметры модели требуется уточнять на основе поступающих данных измерений для получения более точного прогноза. Вследствие высокой общности и простоты реализации для численного решения таких обратных задач часто используются вариационные алгоритмы, осуществляющие минимизацию некоторого целевого функционала [1, 2], пришедшие из теории оптимального управления [3]. Градиент целевого функционала обычно строится с помощью специальной сопряженной задачи. В связи с вариационным подходом стоит упомянуть операторы управления [4], которые получаются при исключении из системы уравнений оптимальности целевого функционала [3] всех переменных, кроме искомой функции управления.

Альтернативная идея построения общих алгоритмов решения обратных задач на основе теории возмущений предложена Г.И. Марчуком в [5, 6]. Она состоит в сведении обратной задачи к системе уравнений с матрицей, определяемой набором сопряженных функций, соответствующих конечному числу различных линейных функционалов от функции состояния. До распространения технологии параллельных вычислений недостатком подхода было то, что требуется на каждой итерации вычислять не одну сопряженную функцию, как в градиентных алгоритмах, а целый их набор. В [7, 8] этот подход применен к задаче поиска источников для линейной модели переноса примесей в атмосфере. В [9] для исследования чувствительности модели предложено собрать все сопряженные уравнения в единую матричную систему. Близким к такому подходу является метод “представителей” (Representer method) [10], адаптированный для решения нелинейных обратных задач, например обратной задач поиска коэффициента диффузии [11]. Идея метода состоит в решении системы уравнений Эйлера–Лагранжа для вариационной постановки обратной задачи с использованием принципа линейной суперпозиции.

Для работы с изображениями высокого разрешения, где значение каждого пикселя является результатом измерения, вычислительных мощностей для непосредственного применения подобных методов может быть недостаточно. В [12] для усвоения данных типа изображений используются понятия “структуры изображения” и “оператора извлечения структуры изображения” (image to structure operator), связанные с предварительным выбором ключевых особенностей из большого массива поступающих данных измерений. Аналогично этому, для работы в другом, более информативном базисе, нежели тот, что определяется исходной системой наблюдений (функционалов), мы от матрицы чувствительности переходим к оператору чувствительности. В этом случае выбор “ключевых особенностей” или “структуры изображения” означает выбор базиса в пространстве результатов измерений, в котором оператор и будет рассматриваться. В [13] такой подход был использован при исследовании обратной коэффициентной задачи теплопроводности с данными измерения температуры на поверхности среды, а в [14] — для исследования и решения обратной коэффициентной диффузионной задачи с данными в виде томографических снимков распределения полей концентраций. Здесь мы применим этот подход к обратной задаче идентификации источников для системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции–деструкции с данными измерений

типа временных рядов значений отдельных компонентов функции состояния модели. Постановки такого типа возникают при мониторинге химического состава атмосферы, когда измерению доступны только некоторые из взаимодействующих компонентов химической системы, причем не те, что выбрасываются источниками. Рассмотрение линеаризованных моделей атмосферной химии позволяет проводить анализ системы методами сингулярного разложения [15].

Получившееся в результате применения аппарата операторов чувствительности уравнение будем решать методом типа Ньютона–Канторовича [16]. Вследствие некорректности обратной задачи для регуляризации обращения генерируемых в ходе работы алгоритма матриц оператора чувствительности будем использовать подход на основе r -псевдообратных матриц, как в [17]. В [14] для решения проблемы избыточного числа неизвестных решение находили на более грубой сетке, нежели та, что использовалась для решения прямой задачи. В данной работе это ограничение было снято за счет использования правых псевдообратных матриц (см., например, [18]), аналогично тому, как это было сделано для линейного случая в [7, 8].

Целью данной работы является численное исследование алгоритма решения обратной задачи идентификации источников (правых частей) для систем нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции–деструкции с помощью операторов чувствительности, методов типа Ньютона–Канторовича и данных измерений в виде временных рядов отдельных компонентов функции состояния модели. Работа продолжает цикл исследований [13, 14, 19] как обобщение на случай рассматриваемой постановки обратной задачи и применения модифицированного алгоритма решения операторного уравнения, получающегося с помощью операторов чувствительности.

2. Постановка задачи

Рассмотрим временной интервал $[0, T]$ и задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции–деструкции (см., например, [20]):

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial t}(t) + P_l(t, \varphi(t))\varphi_l(t) = \Pi_l(t, \varphi(t)) + r_l(t), \quad t \in [0, T], \quad l = 1, \dots, N_c, \quad (1)$$

$$\varphi_l(0) = \varphi_l^0, \quad l = 1, \dots, N_c, \quad (2)$$

где N_c — количество рассматриваемых компонентов, $\varphi_l(t)$ — значение компонента l в момент времени t , $\varphi(t) \in \mathbb{R}^{N_c}$ — вектор функция с элементами $\varphi_l(t)$, $r_l(t)$ — функция источника для компонента l в зависимости от времени. Вектор функции P и вектор функции $\Pi : [0, T] \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c}$ описывают процессы деструкции и продукции соответственно. Пусть $r \in F \subset L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})$ — пространство источников, а $\Phi \subset L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})$ — соответствующее множество решений (1, 2). Будем считать все функции достаточно гладкими для того, чтобы все последующие выкладки имели смысл. Например, $P_l(t, \varphi)$, $\Pi_l(t, \varphi)$ могут быть вещественными полиномами от элементов φ_l с коэффициентами, зависящими от t .

Определение 1. Прямой задачей будем называть задачу определения φ из (1, 2) по известным $\varphi^0 \in \mathbb{R}^{N_c}$ и $r \in F$. Обозначим решение прямой задачи через $\varphi[\varphi^0, r] \in \Phi$.

Пусть система измерений получает временные ряды значений отдельных элементов функции состояния модели. Обозначим через L_{mes} набор индексов наблюдаемых компонентов системы. Определим подпространство $U_{\text{mes}} \subset L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})$ и оператор, который

ставит в соответствие параметрам прямой задачи набор наблюдаемых временных рядов значений компонентов и заменяющий нулями ненаблюдаемые,

$$U_{\text{mes}} = \left\{ \left\{ \left\{ h_l, l \in L_{\text{mes}} \right\}_{l=1}^{N_c} \mid h_l \in L_2(0, T) \right\}, \quad A : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c} \times F \rightarrow U_{\text{mes}} \\ \{\varphi^0, r\} \mapsto \left\{ \left\{ \varphi_l[\varphi^0, r], l \in L_{\text{mes}} \right\}_{l=1}^{N_c}, \right. \\ \left. 0, l \notin L_{\text{mes}} \right\} \end{array} \right.$$

где $\{a_l\}_{l=1}^{N_c}$ обозначает вектор с элементами a_1, \dots, a_{N_c} . Каждый элемент временного ряда является результатом измерений. Для проведения обработки временной ряд необходимо свести к конечному числу значений. Рассмотрим следующее преобразование данных измерений, которое обобщает преобразование Фурье. Зададимся набором из Ξ ортогональных функций $U = \{u_\xi\}_{\xi=1}^\Xi \subset U_{\text{mes}}$. Определим два скалярных произведения и оператор извлечения структуры изображения H_U :

$$\dots : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c} \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R} \\ \{a, b\} \mapsto a^T \text{diag}(\rho)b = \sum_{l=1}^{N_c} a_l b_l \rho_l, \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})} \end{array} \right. : \left\{ \begin{array}{l} L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c}) \times L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c}) \rightarrow \mathbb{R} \\ \{h, \varphi\} \mapsto \int_0^T h(t) \cdot \varphi(t) dt \end{array} \right. ,$$

$$H_U : \left\{ \begin{array}{l} L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c}) \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ \varphi \mapsto \sum_{\xi=1}^\Xi \langle u_\xi, \varphi \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})} e_\xi \end{array} \right. ,$$

где точки “внизу” в обозначении скалярных произведений означают, что в соответствующей записи присутствуют два аргумента, \cdot^T — операция транспонирования, $\rho_l > 0$ — некоторые веса, $\rho = \{\rho_l\}_{l=1}^{N_c}$, $\text{diag}(x)$ — диагональная матрица с элементами вектора x на диагонали, $\mathbb{R}_\rho^{N_c}$ — евклидово пространство со скалярным произведением \dots , e_ξ — ξ -й элемент стандартного (канонического) базиса в \mathbb{R}^Ξ . Сопряженная матрица S^* для матрицы $S \in \mathbb{R}^{N_c \times N_c}$ относительно скалярного произведения \dots определяется соотношением:

$$Sx \cdot y = x \cdot \left((\text{diag}(\rho))^{-1} S^T (\text{diag}(\rho)) y \right) = x \cdot S^* y.$$

Зададим некоторое значение $r^{(*)} \in F$, которое назовем “точным решением дифференциальной обратной задачи”, и определим вектор данных измерений:

$$I = A \left(\varphi^0, r^{(*)} \right) + \delta I, \quad (3)$$

где $\delta I \in U_{\text{mes}}$ — погрешность измерений. Она неизвестна, но известна некоторая информация о ней, например норма $\|H_U \delta I\|_{\mathbb{R}^\Xi} = \delta$.

Определение 2. Дифференциальной обратной задачей идентификации источника назовем задачу определения $r^{(*)}$ из (3) по φ^0, I, δ .

3. Построение оператора чувствительности

Определение 3. Обозначим через $\bar{\nabla}$ оператор разделенных разностей, который ставит в соответствие вектор-функции $S : [0, T] \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c}$ вектор-функцию $\bar{\nabla} S : [0, T] \times \mathbb{R}^{N_c} \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c \times N_c}$, такую, что для любых $t \in [0, T]$ и $\varphi, \delta\varphi \in \mathbb{R}^{N_c}$,

$$S(t, \varphi + \delta\varphi) - S(t, \varphi) = \bar{\nabla} S(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi. \quad (4)$$

Пусть $\bar{\nabla}_i S_l(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)$ — элемент результирующей матрицы в l -й строке и i -м столбце.

Лемма 1 (Аналогично лемме 1 из [19]). Пусть $\varphi = \varphi[\varphi^0, r]$, $\varphi + \delta\varphi = \varphi[\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r]$, тогда для любого элемента $h \in L^2(0, T; \mathbb{R}_p^{N_c})$ верно соотношение

$$\langle h, \delta\varphi \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}_p^{N_c})} = \delta\varphi^0 \cdot \Psi(0) + \langle \delta r, \Psi \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}_p^{N_c})}, \quad (5)$$

где Ψ — решение сопряженной задачи

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial t} + (\text{diag}(P(t, \varphi + \delta\varphi)) + \bar{\nabla} P(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)^* \text{diag}(\varphi) - \bar{\nabla} \Pi(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)^*) \Psi = h, \quad t \in [0, T], \quad (6)$$

$$\Psi(T) = 0. \quad (7)$$

Аргумент t в (6) опущен у функций Ψ , φ , $\delta\varphi$, h для краткости.

Доказательство. Запишем уравнение в вариациях для (1) в векторной форме, опустим аргумент t у функций φ , $\delta\varphi$, перегруппируем и используем (4):

$$\frac{\partial \delta\varphi}{\partial t} + \text{diag}(P(t, \varphi + \delta\varphi)) \delta\varphi + \text{diag}(\bar{\nabla} P(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi) \varphi = \bar{\nabla} \Pi(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi + \delta r. \quad (8)$$

Скалярно домножим (8) на произвольную достаточно гладкую вектор-функцию $\Psi(t) \in \mathbb{R}^{N_c}$ на временном интервале

$$\begin{aligned} & \int_0^T \left(\frac{\partial \delta\varphi}{\partial t} + (\text{diag}(P(t, \varphi + \delta\varphi)) - \bar{\nabla} \Pi(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)) \delta\varphi \right) \cdot \Psi dt \\ &= \int_0^T (-\text{diag}(\bar{\nabla} P(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi) \varphi) \cdot \Psi dt + \int_0^T \delta r \cdot \Psi dt. \end{aligned} \quad (9)$$

Пусть $\delta\varphi_i$ — i -й элемент $\delta\varphi \in \mathbb{R}^{N_c}$, тогда верны тождества

$$\begin{aligned} (\text{diag}(\bar{\nabla} P(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi) \varphi) \cdot \Psi &= \sum_l \left(\sum_i \bar{\nabla}_i P_l(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \delta\varphi_i \right) \varphi_l \Psi_l \rho_l \\ &= \sum_i \left(\sum_l \bar{\nabla}_i P_l(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi) \varphi_l \Psi_l \rho_l \right) \rho_i^{-1} \rho_i \delta\varphi_i \\ &= \left((\text{diag}(\rho))^{-1} \bar{\nabla} P(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)^T \text{diag}(\rho) \text{diag}(\varphi) \Psi \right) \cdot \delta\varphi \\ &= (\bar{\nabla} P(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)^* \text{diag}(\varphi) \Psi) \cdot \delta\varphi, \end{aligned}$$

$$\int_0^T \frac{\partial \delta\varphi}{\partial t} \cdot \Psi dt = \delta\varphi \cdot \Psi \Big|_{t=0}^{t=T} + \int_0^T \delta\varphi \cdot \left(-\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dt.$$

Из (9) следует

$$\begin{aligned} & \int_0^T \delta\varphi \cdot \left(-\frac{\partial \Psi}{\partial t} + (\text{diag}(P(t, \varphi + \delta\varphi)) - \bar{\nabla} \Pi(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)^*) \Psi \right) dt + \\ & \int_0^T \delta\varphi \cdot (\bar{\nabla} P(t, \varphi + \delta\varphi, \varphi)^* \text{diag}(\varphi) \Psi) dt + \delta\varphi \cdot \Psi \Big|_{t=0}^{t=T} = \int_0^T \delta r \cdot \Psi dt. \end{aligned} \quad (10)$$

Учитывая в (10) соотношения (6) и (7), получим требуемое. \square

Обозначим решение сопряженной задачи (6, 7) через $\Psi[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, h]$.

Теорема 1. Для любых $r + \delta r$, $r \in F$, $\varphi^0 + \delta\varphi^0$, $\varphi^0 \in \mathbb{R}^{N_c}$ и $U \subset U_{\text{mes}}$ верно соотношение

$$H_U A(\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r) - H_U A(\varphi^0, r) = M_U^0[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r] \delta\varphi^0 + M_U[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r] \delta r,$$

$$M_U^0[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r] : \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ z \mapsto \{\Psi_l[u_\xi](0)\}_{\xi=1, l=1}^{\Xi, N_c} \text{diag}(\rho) z \end{cases}, \quad (11)$$

$$M_U[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r] : \begin{cases} F \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ z \mapsto \int_0^T \{\Psi_l[u_\xi](t)\}_{\xi=1, l=1}^{\Xi, N_c} \text{diag}(\rho) z(t) dt \end{cases}, \quad (12)$$

где $\Psi[u_\xi] = \Psi[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, u_\xi]$.

Доказательство. По определению операторов A и H_U имеем

$$H_U (A(\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r) - A(\varphi^0, r)) = \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle u_\xi, \varphi[\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r] - \varphi[\varphi^0, r] \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} e_\xi.$$

В силу леммы 1 для $\Psi[u_\xi] = \Psi[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, u_\xi]$

$$\begin{aligned} & \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle u_\xi, \varphi[\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r] - \varphi[\varphi^0, r] \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} e_\xi \\ &= \sum_{\xi=1}^{\Xi} e_\xi \left((\Psi[u_\xi](0))^T \text{diag}(\rho) \delta\varphi^0 + \int_0^T (\Psi[u_\xi](t))^T \text{diag}(\rho) \delta r(t) dt \right) \\ &= \left(\sum_{\xi=1}^{\Xi} e_\xi (\Psi[u_\xi](0))^T \right) \text{diag}(\rho) \delta\varphi^0 + \int_0^T \left(\sum_{\xi=1}^{\Xi} e_\xi (\Psi[u_\xi](t))^T \right) \text{diag}(\rho) \delta r(t) dt, \end{aligned}$$

Используя обозначения (11), (12), получаем требуемое. \square

Таким образом, любая пара “оператора измерений” (в данном случае композиции оператора H_U и оператора проектирования на U_{mes}) и “неопределенностей” модели (в данном случае r) порождает свой оператор чувствительности (в данном случае $M_U[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r]$), который является характеристикой рассматриваемой обратной задачи. В частности, его свойства можно изучать методами сингулярного разложения, как в [13, 14]. Теорема 1 позволяет получить семейство квазилинейных операторных уравнений, связывающих искомые величины и данные обратной задачи (3).

Следствие 1. Для любых $r \in F$ и системы ортогональных функций $U \subset U_{\text{mes}}$ выполняется тождество

$$H_U (I - A(\varphi^0, r)) = M_U[\varphi^0, r, 0, 0] (r^{(*)} - r) + Q, \quad (13)$$

$$Q = (M_U[\varphi^0, r, 0, r^{(*)} - r] - M_U[\varphi^0, r, 0, 0]) (r^{(*)} - r) + H_U \delta I. \quad (14)$$

В силу конечности сумм и при достаточной гладкости вектор-функций продукции и деструкции можно показать, что второе слагаемое в правой части (14) является слагаемым второго порядка малости относительно $r^{(*)} - r$, поэтому $M_U[\varphi^0, r, 0, 0]$ может быть использована в качестве производной Фреше $H_U A(\varphi^0, r)$.

4. Численные алгоритмы

Для численного решения прямой и обратной задач введем расчетную сетку $\omega_t = \{t^j\}_{j=1}^{N_t} \subset [0, T]$ с интервалами длины $\Delta t^{j+0.5}$, где $t^1 = 0$ и $t^{N_t} = T$. Будем использовать ту же численную схему, что и в [19]:

$$\phi_l^{j+1} = \phi_l^j L^j(P_l(t^j, \phi^j)) + G^j(P_l(t^j, \phi^j))(\Pi_l(t^j, \phi^j) + r_l^j), \quad j = 1, \dots, N_t - 1, \quad (15)$$

$$\phi_l^1 = \varphi_l^0, \quad (16)$$

где $l = 1, \dots, N_c$, $\phi \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$, ϕ_l^j соответствует значению на j -м слое по времени для l -го компонента функции состояния, $\phi^j \in \mathbb{R}^{N_c}$ — вектор значений ϕ на j -м слое по времени и

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

$\Delta t = \Delta t^{j+0.5}$, $0 < \varepsilon_{\min} < 1 < \varepsilon_{\max}$ — некоторые заданные константы, значения которых связаны с максимальным и минимальным отрицательными значениями показателей экспоненты, при которых она относительно точно вычисляется на ЭВМ. Выполнение неравенства $\varepsilon_{\min} \leq 1$ необходимо для того, чтобы первое слагаемое в левой части (15) сохраняло знак ϕ_l^j при $P \geq 0$. Заметим, что $P_l(t, \phi)$ может обращаться в 0, однако деление на $P_l(t, \phi)$ в численной схеме (15), (16) допускается только при $P_l(t, \phi)\Delta t > \varepsilon_{\min} > 0$.

Определение 4. Дискретной прямой задачей будем называть задачу определения ϕ из (15, 16) по известным $\varphi^0 \in \mathbb{R}^{N_c}$ и $r \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$. Обозначим решение дискретной прямой задачи через $\phi[\varphi^0, r] \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$.

Определим дискретные аналоги U_{mes} и оператора A :

$$\bar{U}_{\text{mes}} = \left\{ \left\{ \left\{ h_l, l \in L_{\text{mes}} \right\}_{l=1}^{N_c} \mid h_l \in \mathbb{R}^{N_t} \right\} \subset \mathbb{R}^{N_c \times N_t}, \bar{A} : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c} \times \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1} \rightarrow \bar{U}_{\text{mes}} \\ \{\varphi^0, r\} \mapsto \left\{ \left\{ \phi_l[\varphi^0, r], l \in L_{\text{mes}} \right\}_{l=1}^{N_c}, \right. \\ \left. 0, l \notin L_{\text{mes}} \right\}_{l=1}^{N_c} \end{array} \right\},$$

где $\phi_l[\varphi^0, r] \in \mathbb{R}^{N_t}$ соответствует изменению значения l -го компонента решения дискретной прямой задачи по временным слоям. Аналогично непрерывному случаю, можно определить скалярное произведение и оператор извлечения структуры изображения, соответствующий набору из Ξ ортогональных функций $\bar{U} = \{\bar{u}_\xi\}_{\xi=1}^\Xi \subset \bar{U}_{\text{mes}}$:

$$\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c \times N_t} \times \mathbb{R}^{N_c \times N_t} \rightarrow \mathbb{R} \\ \{h, \phi\} \mapsto \sum_{j=1}^{N_t} \phi^j \cdot h^j \delta t^j \end{array} \right\}, \quad \bar{H}_{\bar{U}} : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c \times N_t} \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ \phi \mapsto \sum_{\xi=1}^\Xi \langle u_\xi, \phi \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} e_\xi \end{array} \right\},$$

где δt^j — некоторые заданные веса по времени, например

$$\delta t^j = \begin{cases} \Delta t^{j+0.5}, & j = 1, \\ (\Delta t^{(j-1)+0.5} + \Delta t^{j+0.5})/2, & 1 < j < N_t, \quad \delta t^0 = \delta t^1. \\ \Delta t^{(j-1)+0.5}, & j = N_t, \end{cases}$$

Зададим некоторое значение $\bar{r}^{(*)} \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$, которое назовем “точным решением дискретной обратной задачи”, и определим вектор данных измерений:

$$\bar{I} = \bar{A} \left(\varphi^0, \bar{r}^{(*)} \right) + \delta \bar{I}, \quad (17)$$

где $\delta \bar{I} \in \bar{U}_{\text{mes}}$ — погрешность измерений. Она неизвестна, но известна некоторая информация о ней, например норма $\| \bar{H}_{\bar{U}} \delta \bar{I} \|_{\mathbb{R}^{\Xi}} = \bar{\delta}$.

Определение 5. Дискретной обратной задачей идентификации источника назовем задачу определения $\bar{r}^{(*)}$ из (17) по $\varphi^0, \bar{I}, \bar{\delta}$.

Далее под обратной задачей будем понимать дискретную обратную задачу.

Лемма 2 ([19]). Пусть $\phi^{j+1}, \phi^{j+1} + \delta \phi^{j+1} \in \mathbb{R}^{N_c}$ — результаты вычисления по схеме (15), (16), соответствующие значениям функции состояния на предыдущем шаге $\phi^j, \phi^j + \delta \phi^j \in \mathbb{R}^{N_c}$ и источникам $r^j, r^j + \delta r^j \in \mathbb{R}^{N_c}$, тогда уравнение в вариациях имеет вид

$$\delta \phi^{j+1} = W^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j) \delta \phi^j + R^j(t^j, \phi^j) \delta r^j, \quad (18)$$

где

$$W^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j) = \text{diag}_{l=1, \dots, N_c} L^j(p_l^2) + \left\{ S_l^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j) \right\}_{l=1}^{N_c},$$

$$R^j(t^j, \phi^j) = \text{diag}_{l=1, \dots, N_c} G^j(p_l^1), \quad p_l^2 = P_l(t^j, \phi^j + \delta \phi^j), \quad p_l^1 = P_l(t^j, \phi^j).$$

Здесь $\{S_l\}_{l=1}^{N_c}$ обозначает матрицу со строками S_l . Если $p_l^2 = p_l^1$, то

$$S_l^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j) = G^j(p_l^1) \bar{\nabla} \Pi_l(t, \phi^j + \delta \phi^j, \phi^j),$$

иначе

$$S_l^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j) = G^j(p_l^1) \bar{\nabla} \Pi_l(t, \phi^j + \delta \phi^j, \phi^j) +$$

$$\left(\phi_l^j \frac{L^j(p_l^2) - L^j(p_l^1)}{p_l^2 - p_l^1} + \frac{G^j(p_l^2) - G^j(p_l^1)}{p_l^2 - p_l^1} (\Pi_l(t, \phi^j + \delta \phi^j) + r_l^j + \delta r_l^j) \right) \times$$

$$\bar{\nabla} P_l(t, \phi^j + \delta \phi^j, \phi^j).$$

Лемма 3 (Аналогично лемме 3 из [19]). Если $\phi = \phi[\varphi^0, r]$, $\phi + \delta \phi = \phi[\varphi^0 + \delta \varphi^0, r + \delta r]$ и задан $h \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$, то верно соотношение

$$\langle \delta \phi, h \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}_p^{N_c})} = \delta \varphi^0 \cdot \psi^0 \delta t^0 + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \psi^j \delta t^j, \quad (19)$$

где

$$\psi^{j-1} \frac{\delta t^{j-1}}{\delta t^j} = (W^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j))^* \psi^j + h^j, \quad j = 1, \dots, N_t, \quad (20)$$

$$\psi^{N_t} = 0, \quad (21)$$

и h^j — столбцы h .

Доказательство. Скалярно умножая уравнение в вариациях (18) на сопряженный вектор $\psi^j \in \mathbb{R}^{N_c}$ и суммируя по временному индексу j , получим

$$\sum_{j=1}^{N_t-1} \delta \phi^{j+1} \cdot \psi^j \delta t^j + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta \phi^j \cdot (-W^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j))^* \psi^j \delta t^j = \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \psi^j \delta t^j.$$

Воспользуемся соотношением

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\phi^{j+1} \cdot \psi^j \delta t^j &= \sum_{l=2}^{N_t} \delta\phi^l \cdot \psi^{l-1} \delta t^{l-1} \\ &= \delta\phi^{N_t} \cdot \psi^{N_t-1} \delta t^{N_t-1} + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\phi^j \cdot \psi^{j-1} \delta t_j \frac{\delta t^{j-1}}{\delta t^j} - \delta\phi^1 \cdot \psi^0 \delta t^0, \end{aligned}$$

тогда

$$\begin{aligned} \delta\phi^{N_t} \cdot \psi^{N_t-1} \frac{\delta t^{N_t-1}}{\delta t^{N_t}} \delta t^{N_t} + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\phi^j \cdot \left(\psi^{j-1} \frac{\delta t^{j-1}}{\delta t^j} - W^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta\phi^j, \delta r^j) \psi^j \right) \delta t^j \\ = \delta\phi^1 \cdot \psi^0 \delta t^0 + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \psi^j \delta t^j. \end{aligned}$$

Пусть выполнены (20, 21), тогда верно (19). \square

Обозначим решение сопряженной задачи (20, 21) через $\psi[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, h]$. При переходе к пределу $\delta\phi^j, \delta r^j \rightarrow 0$ разделенные разности в определении S_l для (18) перейдут в производные. Построение схем для уравнения в вариациях важно при отладке алгоритмов на ЭВМ, так как для согласованных схем прямой и сопряженной задач должно выполняться тождество (19). Если опустить при вычислениях слагаемые выше первого порядка малости, то тождество будет выполняться приближенно, и для проверки требуется численно переходить к пределу.

Следствие 2. *Если задан функционал*

$$\bar{J}(\varphi^0, r) = \sum_{l \in L_{\text{mes}}} \sum_{j=1}^{N_t} \left(\phi_l^j[\varphi^0, r] - \bar{I}_l^j \right)^2 \delta t^j \rho_l, \quad (22)$$

то

$$\begin{aligned} \bar{J}(\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r) - \bar{J}(\varphi^0, r) &= \delta\varphi^0 \cdot \psi^0[\varphi^0, r, 0, 0, h] \delta t^0 + \\ &\quad \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \psi^j[\varphi^0, r, 0, 0, h] \delta t^j + \\ &\quad \delta\varphi^0 \cdot \delta\psi^0[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, h] \delta t^0 + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \delta\psi^j[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, h] \delta t^j + \\ &\quad \sum_{l \in L_{\text{mes}}} \sum_{j=1}^{N_t} \left(\delta\phi_l^j[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r] \right)^2 \delta t^j \rho_l, \quad (23) \end{aligned}$$

где $\phi = \phi[\varphi^0, r]$, $\delta\phi = \phi[\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r] - \phi[\varphi^0, r]$, $\delta\psi[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, h] = \psi[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, h] - \psi[\varphi^0, r, 0, 0, h]$,

$$h_l^j = \begin{cases} 2 \left(\phi_l^j[\varphi^0, r] - \bar{I}_l^j \right), & l \in L_{\text{mes}} \\ 0, & l \notin L_{\text{mes}} \end{cases}.$$

Доказательство. Для доказательства распишем вариацию целевого функционала (22) и воспользуемся леммой 3. Добавляя и вычитая линейные по $\delta\varphi^0$, δr выражения, группируя слагаемые, получим требуемое. \square

При условии достаточной гладкости параметров обратной задачи слагаемые на третьей и четвертой строках (23) являются слагаемыми второго порядка малости. Следовательно, в качестве градиента $\nabla_r \bar{J}$ в $\mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ можно рассматривать

$$(\nabla_r \bar{J}(\varphi^0, r))^j = \text{diag}(\rho)R(t^j, \phi^j)\psi^j[\varphi^0, r, 0, 0, h]\delta t^j, \quad j = 1, \dots, N_t - 1.$$

После нахождения градиента для минимизации функционала (22) можно применять любой градиентный алгоритм, например метод сопряженных градиентов.

Теорема 2. Для любых φ^0 , $\varphi^0 + \delta\varphi^0 \in \mathbb{R}^{N_c}$, r , $r + \delta r \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ и $\bar{U} \subset \bar{U}_{\text{mes}}$ верно тождество

$$\bar{H}_{\bar{U}}\bar{A}(\varphi^0 + \delta\varphi^0, r + \delta r) - \bar{H}_{\bar{U}}\bar{A}(\varphi^0, r) = m_{\bar{U}}^0[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r]\delta\varphi^0 + m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r]\delta r,$$

$$m_{\bar{U}}^0[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r] : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{\Xi} \\ z \mapsto \{\psi_l^0[\bar{u}_\xi] \delta t^0\}_{\xi=1, l=1}^{\Xi, N_c} \text{diag}(\rho) z \end{array} \right\},$$

$$m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r] : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1} \rightarrow \mathbb{R}^{\Xi} \\ z \mapsto \sum_{j=1}^{N_t - 1} \left\{ R_l(t^j, \phi^j)\psi_l^j[\bar{u}_\xi] \right\}_{\xi=1, l=1}^{\Xi, N_c} \text{diag}(\rho) z^j \delta t^j \end{array} \right\},$$

где $\psi[\bar{u}_\xi] = \psi[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r, \bar{u}_\xi]$.

Доказательство. Аналогично доказательству теоремы 1 с использованием леммы 3 и определения $\bar{H}_{\bar{U}}$ вместо леммы 1 и определения H_U . \square

При вычислении оператора чувствительности $m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, \delta\varphi^0, \delta r]$ требуется, во-первых, параллельно решить две независимые прямые задачи, и, во-вторых, параллельно решить Ξ независимых сопряженных задач с различными правыми частями. Следовательно, если не учитывать время на запуск параллельных процессов, то, при условии их достаточного количества ($\geq \Xi$), вычисление оператора чувствительности занимает столько же физического времени, что и вычисление градиента. Такая вычислительная технология была реализована в [14] и в данной работе.

Следствие 3 (Дискретный аналог следствия 1). Для любого $r \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ и системы ортогональных функций $\bar{U} \subset \bar{U}_{\text{mes}}$ выполняется тождество

$$\bar{H}_{\bar{U}}(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r)) = m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, 0, 0] \left(\bar{r}^{(*)} - r \right) + q, \quad (24)$$

$$q = \left(m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, 0, \bar{r}^{(*)} - r] - m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, 0, 0] \right) \left(\bar{r}^{(*)} - r \right) + \bar{H}_{\bar{U}}\delta\bar{I}. \quad (25)$$

Доказательство. В утверждении теоремы 2 положим $\delta\varphi^0 = 0$, $\delta r = \bar{r}^{(*)} - r$. Воспользуемся (17) и получим

$$\bar{H}_{\bar{U}}(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r)) = m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, 0, \bar{r}^{(*)} - r] \left(\bar{r}^{(*)} - r \right) + \bar{H}_{\bar{U}}\delta\bar{I}. \quad (26)$$

Добавим и вычтем из правой части (26) выражение $m_{\bar{U}}[\varphi^0, r, 0, 0] \left(\bar{r}^{(*)} - r \right)$ и затем сгруппируем получившиеся слагаемые для получения требуемого. \square

Следствие 3 утверждает, что решение обратной задачи $\bar{r}^{(*)}$ удовлетворяет семейству операторных уравнений (24), (25) с участием операторов чувствительности $m_{\bar{U}}$, параметризованных пробной функцией $r \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ и системой функций $\bar{U} \subset \bar{U}_{\text{mes}}$ проектирования. Используем этот факт для построения алгоритма решения задачи.

5. Алгоритм решения обратной задачи

В качестве базиса проектирования \bar{U} временных рядов будем рассматривать

$$U_{\Theta} = \{e_{\eta\theta} \mid 0 \leq \theta \leq \Theta, \theta \in \mathbb{Z}, \eta \in L_{\text{mes}}\},$$

$$e_{\eta\theta}^j = \left\{ \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{T} \rho_{\eta}} \cos\left(\frac{\pi\theta t^j}{T}\right), & \theta > 0, l = \eta \\ \frac{1}{\sqrt{T} \rho_{\eta}}, & \theta = 0, l = \eta \\ 0, & l \neq \eta \end{array} \right\}_{l=1}^{N_c} \right\},$$

Выбор Θ можно осуществлять на основе временного разрешения получаемых временных рядов и возможностей вычислительной системы. Таким образом, число элементов базиса возрастает как с увеличением числа измеряемых компонент, так и с увеличением их детализации. Кроме разрешения, количество рассматриваемых базисных векторов можно ограничивать уровнем шума. В этом случае $\Xi = \Theta |L_{\text{mes}}|$, где $|L_{\text{mes}}|$ — количество элементов L_{mes} . Будем считать, что $\Xi < (N_t - 1)N_c$. Разделим начальный отрезок ряда натуральных чисел $1, \dots, \Xi$ на N_p частей. Пусть

$$\Delta p = \left[\frac{\Theta |L_{\text{mes}}|}{N_p} \right], \quad (27)$$

где $[\cdot]$ обозначает взятие целой части.

Пусть известно, что неопределенными являются источники только в заданном наборе веществ. Обозначим их индексы через L_{src} . Рассмотрим следующую операцию проектирования:

$$\text{Pr}_{\text{src}} z : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1} \\ z \mapsto \left\{ \begin{array}{l} z_l, l \in L_{\text{src}} \\ 0, l \notin L_{\text{src}} \end{array} \right\}_{l=1}^{N_c} \end{array} \right. .$$

Задача регуляризации в данном случае формулируется как задача поиска $\bar{r}^{(*)}$ из семейства некорректных (так как $\Xi < (N_t - 1)N_c$) квазилинейных уравнений (24), (25) для различных r и U с частичной информацией о $\delta\bar{I}$. Для ее решения определим итерационно-регуляризованный [21] алгоритм типа Ньютона–Канторовича с использованием правых обратных матриц.

Алгоритм

1. Зададим начальное приближение $r^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$, определим уровень шума $\|\bar{H}_{\bar{U}} \delta\bar{I}\|_{\mathbb{R}^{\Xi}}$, шаг увеличения рассматриваемого сингулярного спектра матрицы оператора чувствительности (далее спектра) Δp согласно (27) и максимальное рассматриваемое число обусловленности cond_{max} . Если шум и начальное приближение таковы, что

$$\left\| \bar{H}_{\bar{U}} \left(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(0)}) \right) \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}} \leq \left\| \bar{H}_{\bar{U}} \delta \bar{I} \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}},$$

то в качестве решения принимается $r^{(0)}$, иначе переходим к следующему шагу.

2. Запустим итерации по величине спектра, начиная с $p = \Delta p$:

- (а) вычисляем матрицу $m^{(k)}$ оператора чувствительности $m_{\bar{U}}[\varphi^0, r^{(k)}, 0, 0]$ в стандартных базисах \mathbb{R}^{Ξ} и $\mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ соответственно, а также сингулярное разложение $m^{(k)} (m^{(k)})^T$. Пусть σ_l — сингулярные числа $m^{(k)}$. Если σ_1 / σ_p больше cond_{\max} , то алгоритм останавливается;
- (б) если нет, то находим

$$\delta r^{(k)} = \text{Pr}_{\text{src}} \left(\sum_{\xi=1}^{N_c(N_t-1)} \delta \bar{r}_{\xi}^{(k)} \bar{e}_{\xi} \right), \quad (28)$$

$$\delta \bar{r}^{(k)} = (m^{(k)})^T \left[m^{(k)} (m^{(k)})^T \right]_p^+ \bar{H}_{\bar{U}} \left(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(k)}) \right), \quad (29)$$

где \bar{e}_{ξ} — элемент стандартного базиса $\mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$, $\delta \bar{r}_{\xi}^{(k)}$ — ξ -й элемент вектора $\delta \bar{r} \in \mathbb{R}^{N_c(N_t-1)}$, $[CC^T]_p^+$ обозначает r -псевдообратную матрицу к матрице CC^T . Для самосопряженной матрицы CC^T сингулярное разложение можно представить в виде:

$$CC^T z = \sum_{l=1}^{\text{rank}(C)} \sigma_l^2 U_l \langle z, U_l \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}},$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}}$ — евклидово скалярное произведение в \mathbb{R}^{Ξ} , $\{U_l\}_{l=1}^{\text{rank}(C)}$ — ортонормированная система левых сингулярных векторов, σ_l — невозрастающая последовательность сингулярных чисел C . И r -псевдообратной матрицей к матрице CC^T назовем

$$[CC^T]_p^+ = \sum_{l=1}^{\min\{p, \text{rank}(C)\}} \frac{U_l}{\sigma_l^2} \langle \cdot, U_l \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}},$$

правой r -псевдообратной матрицей к C будем называть $C^T [CC^T]_p^+$;

- (в) делением пополам выбираем $\gamma^{(k)}$ из условия

$$\left\| \bar{H}_{\bar{U}} \delta \bar{I} \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}} \leq \left\| \bar{H}_{\bar{U}} \left(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(k)} + \gamma \delta r^{(k)}) \right) \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}} < \left\| \bar{H}_{\bar{U}} \left(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(k)}) \right) \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}},$$

где

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} + \gamma^{(k)} \delta r^{(k)};$$

- (г) если $\left\| \bar{H}_{\bar{U}} \delta \bar{I} \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}} \geq \left\| \bar{H}_{\bar{U}} \left(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(k+1)}) \right) \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}}$, то алгоритм останавливается, иначе он продолжает работу до стабилизации итераций. Считаем, что решение стабилизировалось, если

$$\left\| r^{(k+1)} - r^{(k)} \right\| \leq \varepsilon_{\text{stab}} \left\| r^{(k)} \right\|.$$

После стабилизации количество рассматриваемых сингулярных чисел и векторов увеличивается $p := p + \Delta p$.

Замечание 1. Последовательное увеличение количества рассматриваемых сингулярных чисел связано с тем, что, во-первых, задача обращения матрицы $m^{(k)}(m^{(k)})^T$ плохо обусловлена, и, во-вторых, $m^{(k)}$ рассматривается как приближение к аналогичной матрице для $m_{\bar{U}}[\varphi^0, r^{(k)}, 0, \bar{r}^{(*)} - r^{(k)}]$, использование которой сделало бы задачу линейной. Наименьшим шагом является постепенное прибавление по одному сингулярному числу в рассматриваемый спектр ($\Delta\rho = 1$).

Замечание 2. В случае зашумленных данных остановка осуществляется по принципу невязки, т. е. на такой итерации, когда впервые выполняется условие

$$\left\| \bar{H}_{\bar{U}} \left(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(K)}) \right) \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}} \leq \left\| \bar{H}_{\bar{U}} \delta \bar{I} \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}} < \left\| \bar{H}_{\bar{U}} \left(\bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(K-1)}) \right) \right\|_{\mathbb{R}^{\Xi}}.$$

Замечание 3. За счет выбора весов ρ в скалярном произведении $\cdot \cdot$ можно осуществлять “балансировку” данных измерений, соответствующих разным химическим веществам. Это вызвано тем, что величины концентраций различных химических веществ могут существенно различаться (как это будет видно в численных экспериментах).

При исследовании алгоритмов решения некорректных задач ключевыми являются вопросы устойчивости в условиях зашумленных данных и то, как эффективность алгоритма соотносится с эффективностью уже известных алгоритмов. В качестве известного алгоритма для сравнения рассмотрим алгоритм сопряженных градиентов Полака–Рибьера в стандартной реализации GSL [22]:

$$r^{(k+1)} := r^{(k)} - \alpha^{(k)} s^{(k)}, \quad s^{(k)} = \begin{cases} g^{(k)} + \beta^{(k)} s^{(k-1)}, & k > 1 \\ g^{(k)}, & k = 1 \end{cases}, \quad g^{(k)} = -\nabla_r \bar{J}(\varphi^0, r^{(k)}),$$

$$\alpha^{(k)} = \arg \min_{\alpha > 0} \bar{J}(r^{(k)} - \alpha s^{(k)}), \quad \beta^{(k)} = \frac{\langle g^{(k)}, g^{(k)} - g^{(k-1)} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}}}{\langle g^{(k-1)}, g^{(k-1)} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}}}.$$

При работе с зашумленными данными также будем использовать принцип невязки и итеративной регуляризации, т. е. останавливать алгоритм на такой итерации с номером K , на которой впервые выполняется

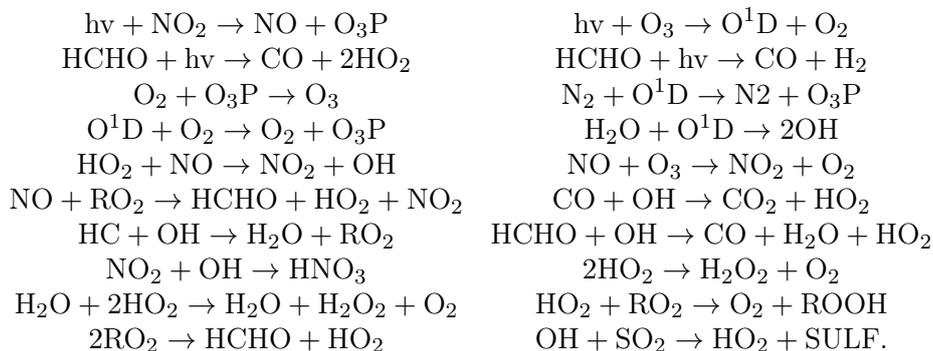
$$\left\| \bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(K)}) \right\|_{L^2(0, T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} \leq \left\| \delta \bar{I} \right\|_{L^2(0, T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})} < \left\| \bar{I} - \bar{A}(\varphi^0, r^{(K-1)}) \right\|_{L^2(0, T; \mathbb{R}_\rho^{N_c})}.$$

Если предполагается использовать алгоритм решения обратной задачи в составе алгоритма усвоения данных, то важными также становятся вопросы его вычислительной эффективности, поэтому будем учитывать и время вычислений.

6. Численные эксперименты

6.1. Модель химической кинетики

В качестве примера рассмотрим следующий модифицированный химический механизм из [23] с последней реакцией, добавленной из [24, с. 549].



Скорости реакций зависят от времени. Систему можно переписать в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений типа продукции–деструкции. Для этого преобразования используем пакет xCellerator [25] для Wolfram Research Mathematica. Кроме того, с помощью Wolfram Research Mathematica производится генерация C++ функций для вычисления операторов продукции Π и деструкции P , а также соответствующих операторов разделенных разностей $\bar{\nabla}\Pi$ и $\bar{\nabla}P$. Подробное описание численной модели приведено в приложении А.

Предположим, что источники выбрасывают вещества NO и NO₂. Временной ход соответствующих значений концентраций представлен на рис. 1а и рис. 1б, временной ход интенсивности источников представлен на рис. 2а и рис. 2б.

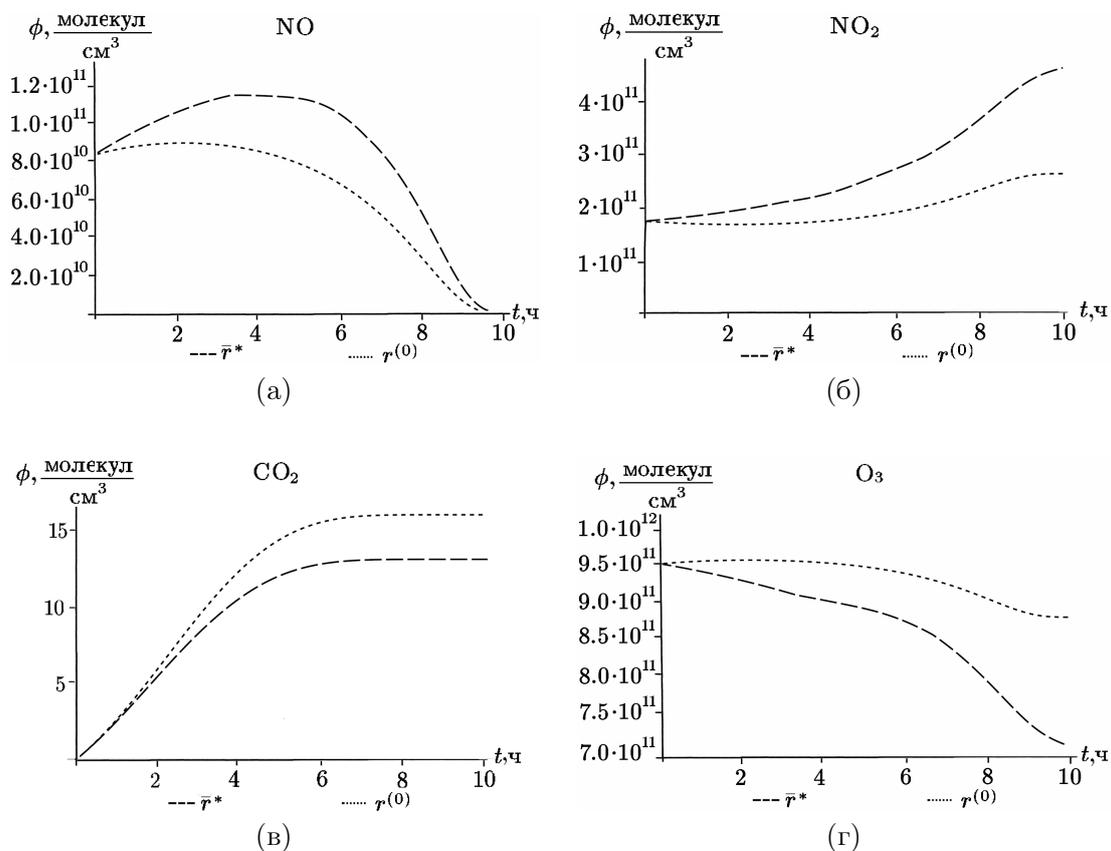


Рис. 1. Сравнение динамики концентраций для NO (а), NO₂ (б), CO₂ (в), O₃ (г), соответствующих $r^{(0)}$ и точному значению источника $\bar{r}^{(*)}$

При решении обратной задачи конкретный вид источников неизвестен, однако будем предполагать, что выбросов других веществ нет ($L_{src} = \{NO, NO_2\}$). Выбросы NO и NO₂ являются следствием работы транспорта и промышленных предприятий. Эти вещества слабо разделимы и часто учитываются вместе как NO_x. Измерению доступны вещества CO₂ и O₃ ($L_{mes} = \{CO_2, O_3\}$). Эти вещества были выбраны из-за того, что, во-первых, их мониторинг осуществим, и, во-вторых, в них наблюдается наибольший отклик на работу источников NO и NO₂. Интервал модельного времени — 10 часов ($T = 10 \cdot 3600$ с). Число точек по времени $N_t = 3000$. В качестве начального приближения $r^{(0)}$ к источникам выберем нулевое. На рис. 1в и рис. 1г представлены значения концентраций, соответствующих точному значению источников $\bar{r}^{(*)}$ и начальному приближению $r^{(0)}$. Видно, что, несмотря на примерно схожий относительный отклик, масштабы величин концентраций существенно отличаются. В связи с этим введем масштабирующий коэффициент в скалярное произведение. Пусть $\rho_{O_3} = 1$ и $\rho_{CO_2} = 10^{12}$. Значения остальных весов единичные.

При постановке численного эксперимента с заданными источниками вычислим решение прямой задачи на сетке ω_t . Временные ряды концентраций соответствующих веществ доступны алгоритму решения обратной задачи в качестве данных измерений. Для исследования устойчивости добавим в данные измерений шум:

$$\bar{I}_l^j = (1 + \delta_n n) \left(\bar{A}(\varphi^0, \bar{r}^{(*)}) \right)_l^j, \quad l = 1, \dots, N_c, \quad j = 1, \dots, N_t,$$

где $\delta_n \geq 0$ — уровень шума, n — равномерно распределенная на отрезке $[-1, 1]$ случайная величина.

6.2. Численное исследование сходимости

Изучим, как зависит скорость сходимости к точному решению от Θ . На рис. 2 представлены результаты восстановления, а на рис. 3 — параметры сходимости алгоритмов. Также на рисунках представлены результаты восстановления и параметры сходимости градиентного алгоритма (Grad). Так как итерации алгоритмов неравнозначны, то вместо номера итераций на оси абсцисс отложено время счета. На основе рис. 2 и 3 можно сделать вывод, что с увеличением числа Θ время вычисления увеличивается, однако увеличивается и достигаемая точность. Предложенный алгоритм превосходит градиентный по точности.

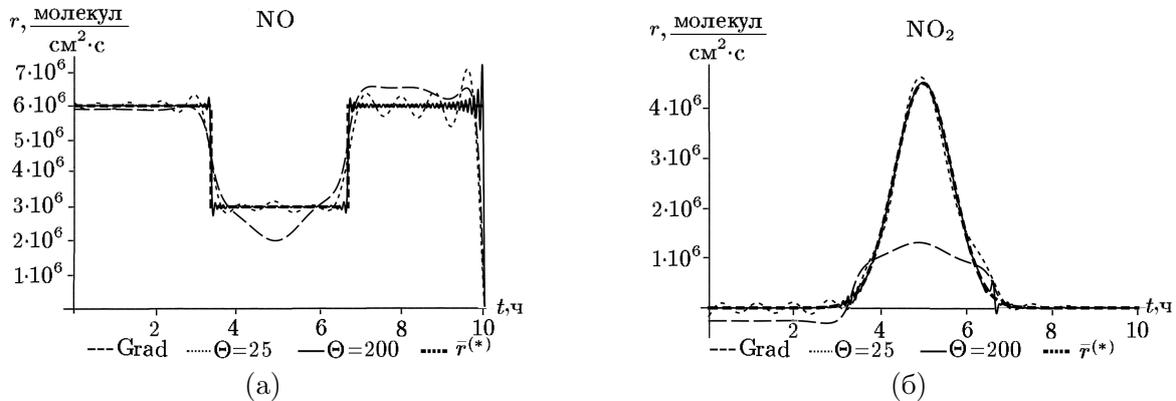


Рис. 2. Результаты восстановления $\bar{r}^{(*)}$ по точным данным измерений ($\delta I = 0$) для NO (а) и NO₂ (б)

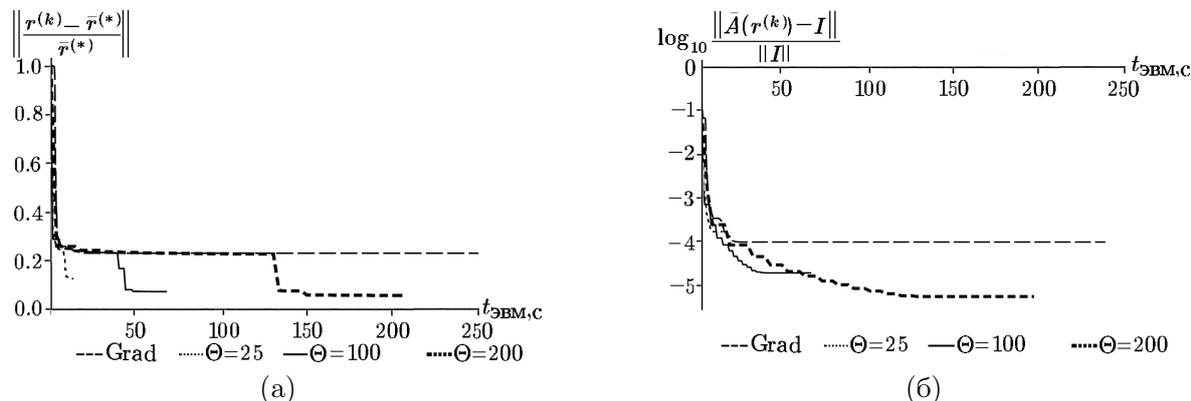


Рис. 3. Зависимость от времени вычисления параметров сходимости алгоритмов с точными данными измерений ($\delta I = 0$): относительной ошибки (а); десятичного логарифма относительной невязки (б)

Изучим чувствительность алгоритма к величине шума в данных. Согласно [26], ошибка измерения озона варьируется в пределах 2% – 10% в зависимости от измерительной системы, поэтому в численных экспериментах будем рассматривать уровни шума 0.1% – 10%. На рис. 4 представлен результат восстановления источников и на рис. 5 – параметры сходимости алгоритма при $\Theta = 200$ и различном уровне шума в данных. Анализируя рис. 4 и рис. 5, можно заключить, что при уменьшении уровня шума результат восстановления улучшается. Кроме того, можно заметить, что при уровне шума $\delta_n = 0.1$ наблюдается некоторое увеличение относительной ошибки в ходе вычислений. Мы считаем, что это вызвано слишком быстрым увеличением рассматриваемого спектра при данном уровне шума. В предыдущих экспериментах $N_p = 25$. Выявления связи между оптимальной скоростью увеличения спектра и уровнем шума – это задача для дальнейшего исследования. Здесь представим результат численного эксперимента с уровнем шума $\delta_n = 0.1$ и $\Theta = 200$ для различного количества рассматриваемых отрезков спектра N_p . На рис. 6 представлен результат восстановления и на рис. 7 – параметры сходимости. В данном случае увеличение количества N_p позволило увеличить устойчивость восстановления при увеличении времени, требуемого на получение определенной точности.

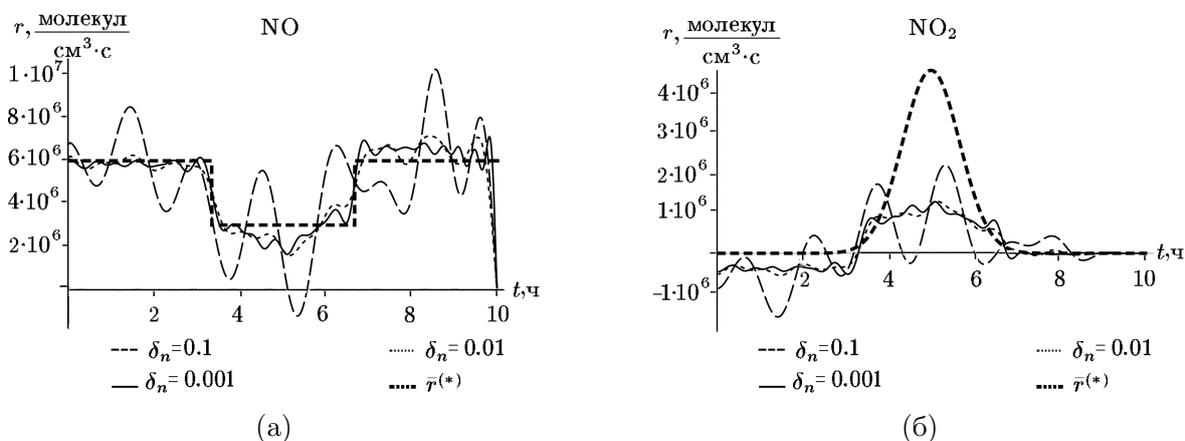


Рис. 4. Результаты восстановления $\bar{r}^{(*)}$ при $\Theta = 200$ и различных δ_n для NO (а) и NO₂ (б)

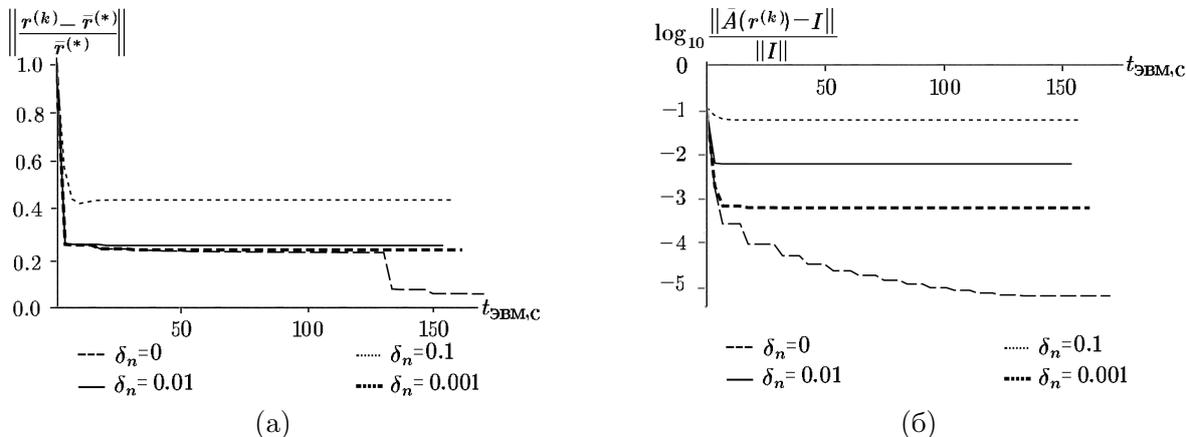


Рис. 5. Зависимость от времени вычисления параметров сходимости алгоритмов при $\Theta = 200$ и различных δ_n : относительной ошибки (а), десятичного логарифма относительной невязки (б)

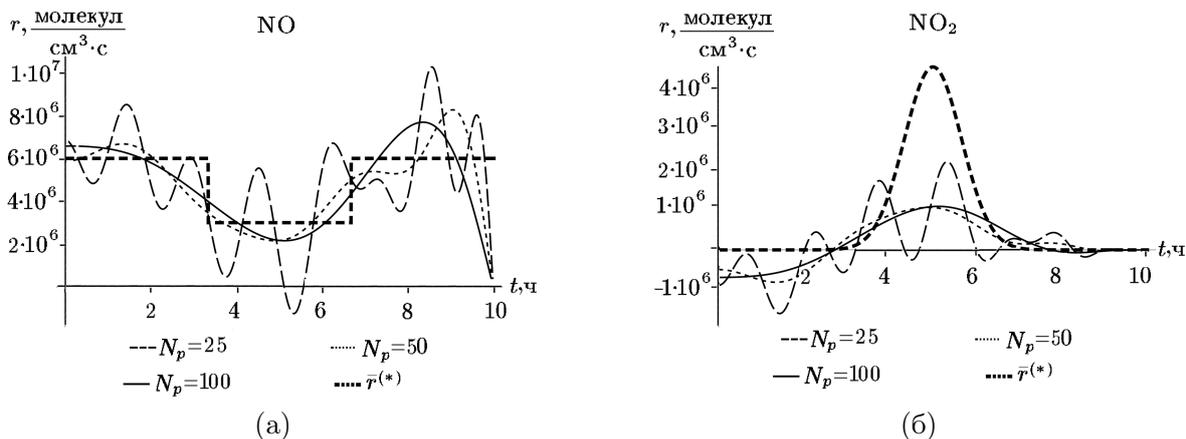


Рис. 6. Результаты восстановления \bar{r}^* при $\Theta = 200$, уровне шума $\delta_n = 0.1$ и различном количестве отрезков деления спектра N_p для NO (а) и NO₂ (б)

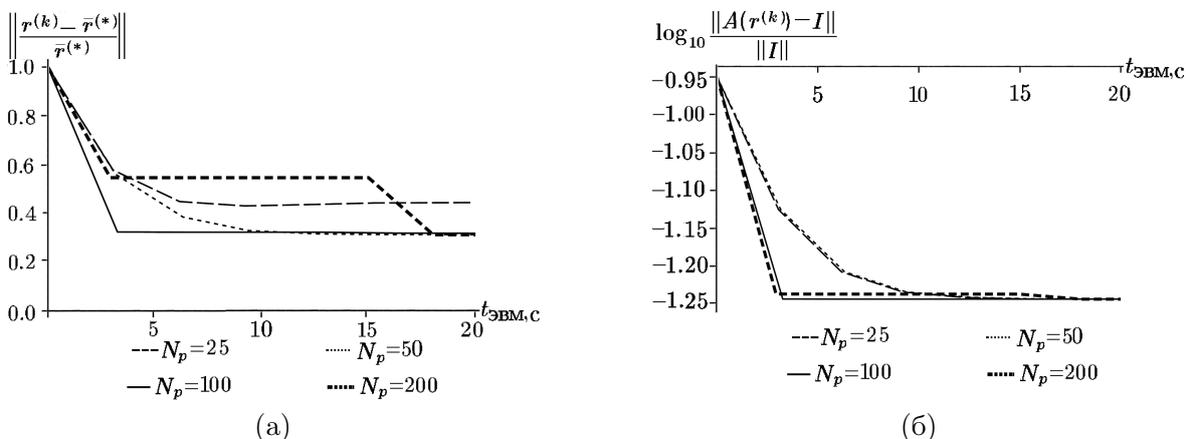


Рис. 7. Зависимость от времени вычисления параметров сходимости алгоритмов при $\Theta = 200$, уровне шума $\delta_n = 0.1$ и различном количестве отрезков деления спектра N_p : относительной ошибки (а), десятичного логарифма относительной невязки (б)

7. Заключение

В работе представлен алгоритм типа Ньютона–Канторовича для решения задачи идентификации источников на основе оператора чувствительности и правых r -псевдообратных матриц, примененный к обратной задаче для модели химической кинетики. В ходе вычислений количество рассматриваемых сингулярных чисел матрицы оператора чувствительности при построении r -псевдообратных матриц в рамках итераций алгоритма типа Ньютона–Канторовича увеличивается с заданной скоростью. Процедура вычисления матрицы оператора чувствительности хорошо распараллеливается, так как состоит в независимом решении набора сопряженных уравнений. Проведено численное исследование устойчивости алгоритма в условиях зашумленных данных и его сравнение с градиентным алгоритмом решения обратной задачи. В проведенных численных экспериментах было получено, что с увеличением учитываемой детализации изображений (т. е. числа используемых при конструкции оператора извлечения структуры изображения элементов косинус-базиса) время вычислений возрастает, но также увеличивается и точность получаемого решения. При использовании достаточного количества элементов базиса предлагаемый алгоритм превзошел градиентный по точности. Кроме того, он устойчив к погрешностям измерений. Устойчивость можно увеличивать за счет более медленного увеличения количества рассматриваемых сингулярных чисел матрицы оператора.

Ближайшие направления развития алгоритма — обобщение на более широкий класс моделей, учитывающих процессы пространственного переноса. Еще одной важной задачей является исследование эффективности алгоритма при более высоких уровнях погрешностей измерений, нежели те, что были рассмотрены в данной работе.

Благодарности. Автор благодарен рецензентам за внимательное прочтение рукописи и конструктивные замечания.

Приложение

А. Описание численной модели атмосферной химии

$$\begin{aligned} \varphi_l &= \{\text{CO}, \text{CO}_2, \text{H}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{H}_2\text{O}_2, \text{HC}, \text{HCHO}, \text{HNO}_3, \text{HO}_2, \text{N}_2, \text{NO}\}, & l = 1, \dots, 11, \\ \varphi_l &= \{\text{NO}_2, \text{O}^1\text{D}, \text{O}_2, \text{O}_3, \text{O}_3\text{P}, \text{OH}, \text{RO}_2, \text{ROOH}, \text{SO}_2, \text{SULF}, \text{ZProd}\}, & l = 12, \dots, 22. \end{aligned}$$

Оператор деструкции:

$$\begin{aligned} P_l(t, \varphi) &= \{k_{12}\text{OH}, 0, 0, k_8\text{O}^1\text{D}, 0, k_{13}\text{OH}, k_{14}\text{OH} + k_3 + k_4, 0\}, & l = 1, \dots, 8, \\ P_l(t, \varphi) &= \{2(k_{17}\text{H}_2\text{O} + k_{16})\text{HO}_2 + k_9\text{NO} + k_{18}\text{RO}_2, 0\}, & l = 9, \dots, 10, \\ P_l(t, \varphi) &= \{k_9\text{HO}_2 + k_{10}\text{O}_3 + k_{11}\text{RO}_2, k_{15}\text{OH} + k_1, k_8\text{H}_2\text{O} + k_6\text{N}_2 + k_7\text{O}_2\}, & l = 11, \dots, 13, \\ P_l(t, \varphi) &= \{k_5\text{O}_3\text{P}, k_{10}\text{NO} + k_2, k_5\text{O}_2\}, & l = 14, \dots, 16, \\ P_l(t, \varphi) &= \{k_{12}\text{CO} + k_{13}\text{HC} + k_{14}\text{HCHO} + k_{15}\text{NO}_2 + k_{20}\text{SO}_2, k_{18}\text{HO}_2 + k_{11}\text{NO} + 2k_{19}\text{RO}_2\}, & l = 17, 18, \\ P_l(t, \varphi) &= \{0, k_{20}\text{OH}, 0, 0\}, & l = 19, \dots, 22. \end{aligned}$$

Оператор продукции:

$$\begin{aligned}
 \Pi_l(t, \varphi) &= \{\text{HCHO} (k_{14}\text{OH} + k_3 + k_4), k_{12}\text{CO OH}, k_4\text{HCHO}\}, & l = 1, \dots, 3, \\
 \Pi_l(t, \varphi) &= \{k_{13}\text{HC OH} + (k_{14}\text{OH} + 2k_3)\text{HCHO}, \text{HO}_2^2 (k_{17}\text{H}_2\text{O} + k_{16}), 0\}, & l = 4, \dots, 6, \\
 \Pi_l(t, \varphi) &= \{k_{11}\text{NO RO}_2, k_{15}\text{NO}_2\text{OH}, \text{OH} (k_{12}\text{CO} + k_{14}\text{HCHO} + k_{20}\text{SO}_2) + k_{11}\text{NO RO}_2\}, & l = 7, \dots, 9, \\
 \Pi_l(t, \varphi) &= \{0, k_1\text{NO}_2, \text{NO} (k_9\text{HO}_2 + k_{10}\text{O}_3 + k_{11}\text{RO}_2), k_2\text{O}_3\}, & l = 10, \dots, 13, \\
 \Pi_l(t, \varphi) &= \{\text{HO}_2 (k_{17}\text{H}_2\text{O HO}_2 + k_{16}\text{HO}_2 + k_{18}\text{RO}_2) + k_{10}\text{NO O}_3 + k_2\text{O}_3, k_5\text{O}_2\text{O}_3\text{P}\}, & l = 14, 15, \\
 \Pi_l(t, \varphi) &= \{k_6\text{N}_2\text{O}^1\text{D} + k_1\text{NO}_2 + k_7\text{O}^1\text{D O}_2, 2k_8\text{H}_2\text{O O}^1\text{D} + k_9\text{HO}_2\text{NO}, k_{13}\text{HC OH}\}, & l = 16, \dots, 18, \\
 \Pi_l(t, \varphi) &= \{k_{18}\text{HO}_2\text{RO}_2, 0, k_{20}\text{OH SO}_2, k_{19}\text{RO}_2^2\}, & l = 19, \dots, 22.
 \end{aligned}$$

Коэффициенты скоростей реакций k_l , $l = 1, \dots, 4$, зависят от времени (заданы на основе скоростей реакций из [27]), остальные постоянны ($k_5 - k_{19}$ взяты из [23], k_{20} из [24, с. 552]):

$$\begin{aligned}
 k_1(t) &= P_{HUX}(1.07 \cdot 10^{-2}, 1.01319, 0.83330, \chi_{\text{zenith}}(t)), \\
 k_2(t) &= P_{HUX}(2 \cdot 3.22 \cdot 10^{-5}, 4.45037, 0.78028, \chi_{\text{zenith}}(t)), \\
 k_3(t) &= P_{HUX}(4.05 \cdot 10^{-5}, 2.06917, 0.80267, \chi_{\text{zenith}}(t)), \\
 k_4(t) &= P_{HUX}(4.92 \cdot 10^{-5}, 1.60973, 0.80184, \chi_{\text{zenith}}(t)), \\
 k_5 &= 1.41 \cdot 10^{-14}, \quad k_6 = 2.58 \cdot 10^{-11}, \quad k_7 = 4.01 \cdot 10^{-11}, \quad k_8 = 2.2 \cdot 10^{-10}, \quad k_9 = 7.67 \cdot 10^{-12}, \\
 k_{10} &= 1.82 \cdot 10^{-14}, \quad k_{11} = 4 \cdot 10^{-12}, \quad k_{12} = 2.09 \cdot 10^{-13}, \quad k_{13} = 2.2 \cdot 10^{-12}, \\
 k_{14} &= 9.2 \cdot 10^{-12}, \quad k_{15} = 8.62 \cdot 10^{-12}, \quad k_{16} = 2.86 \cdot 10^{-12}, \quad k_{17} = 6.42 \cdot 10^{-30}, \\
 k_{18} &= 1.30 \cdot 10^{-11}, \quad k_{19} = 2.56 \cdot 10^{-11}, \quad k_{20} = 7.51005 \cdot 10^{-13},
 \end{aligned}$$

где $\chi_{\text{zenith}}(t)$ — зенитный угол солнца в радианах, зависящий от широты и долготы местности, даты и времени суток,

$$P_{HUX}(x, y, z, \chi) = x \begin{cases} \exp\left(y \left(1 - \frac{1}{\cos(\chi z)}\right)\right), & \left(y \left(1 - \frac{1}{\cos(\chi z)}\right) > -30\right) \& \left(\chi z < \frac{\pi}{2}\right), \\ 9.357623 \cdot 10^{-14}, & \left(y \left(1 - \frac{1}{\cos(\chi z)}\right) \leq -30\right) \parallel \left(\chi z \geq \frac{\pi}{2}\right). \end{cases}$$

Для реакций первого порядка размерность скоростей реакций — $[c^{-1}]$, для реакций второго порядка — $\left[\frac{\text{см}^3}{\text{с молекул}}\right]$. Значения концентраций при $t = 0$ в $\left[\frac{\text{молекул}}{\text{см}^3}\right]$:

$$\begin{aligned}
 \text{CO} &= 100 \cdot C_{\text{factor}}, \quad \text{H}_2\text{O} = 1.25 \cdot 10^8 \cdot C_{\text{factor}}, \quad \text{HC} = 20 \cdot C_{\text{factor}}, \quad \text{HCHO} = 2 \cdot C_{\text{factor}}, \\
 \text{N}_2 &= 0.78 \cdot C_{\text{air}} \cdot C_{\text{factor}}, \quad \text{NO} = 5 \cdot C_{\text{factor}}, \quad \text{NO}_2 = 5 \cdot C_{\text{factor}}, \quad \text{O}_2 = 0.21 \cdot C_{\text{air}} \cdot C_{\text{factor}}, \\
 \text{O}_3 &= 40 \cdot C_{\text{factor}}, \quad \text{SO}_2 = 0.2 \cdot C_{\text{factor}}, \quad C_{\text{factor}} = 2.55 \cdot 10^{10}, \quad C_{\text{air}} = 2.54682 \cdot 10^{19}.
 \end{aligned}$$

Концентрации остальных веществ при $t = 0$ — нулевые. Концентрации H_2O , N_2 , O_2 считаются постоянными на всем интервале $[0, T]$.

Литература

1. **Васильев Ф.П.** Методы решения экстремальных задач. — М.: Наука, 1981.
2. **Алифанов О.М.** Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложения к обратным задачам теплообмена / О.М. Алифанов, Е.А. Артюхин, С.В. Румянцев. — М.: Наука, 1988; Перевод: Alifanov O.M., Artiukhin E.A., and Rumiantsev S.V. Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems With Applications to Inverse Heat Transfer Problems. — Begell House, 1995.
3. **Лионс Ж.-Л.** Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными / Р.В. Гамбрилидзе. — М.: Мир, 1972; Перевод: Lions J. Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations. — Berlin: Springer-Verlag, 1971.
4. **Shutyaev V.P.** The properties of control operators in one problem on data control and algorithms for its solution // Mathematical Notes. — 1995. — Vol. 57, № 6. — P. 668–671.
5. **Марчук Г.И.** О постановке некоторых обратных задач // ДАН СССР. — 1964. — Т. 156, № 3. — С. 503–506.
6. **Марчук Г.И.** Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. — М.: Наука, 1992; Перевод: Marchuk G.I. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. — Netherlands: Springer, 1995.
7. **Issartel J.-P.** Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2003. — Vol. 3, № 6. — P. 2111–2125.
8. **Issartel J.-P.** Emergence of a tracer source from air concentration measurements, a new strategy for linear assimilation // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2005. — Vol. 5, № 1. — P. 249–273.
9. **Ustinov E.A.** Adjoint sensitivity analysis of atmospheric dynamics: Application to the case of multiple observables // J. of the Atmospheric Sciences. — 2001. — Vol. 58, № 21. — P. 3340–3348.
10. **Bennett A.F.** Inverse Methods in Physical Oceanography. — Cambridge: Cambridge University Press, 1992. — (Cambridge Monographs on Mechanics).
11. **Iglesias M.A., Dawson C.** An iterative representer-based scheme for data inversion in reservoir modeling C. Dawson // Inverse Problems. — 2009. — Vol. 25, № 3. — P. 1–34.
12. **Le Dimet F.X., Souopgui I., Titaud O. et al.** Toward the assimilation of images // Nonlinear Processes in Geophysics. — 2015. — Vol. 22, № 1. — P. 15–32. — <http://www.nonlin-processes-geophys.net/22/15/2015/npg-22-15-2015.pdf>.
13. **Пененко А.В.** О решении обратной коэффициентной задачи теплопроводности методом проекции градиента // Сибирские электронные математические известия. Тр. Первой международной молодежной школы-конференции “Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач”. Часть I. — 2010. — С. 178–198.
14. **Пененко А.В., Николаев С.В., Голушко С.К. и др.** Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии // Мат. биол. и биоинф. — 2016. — Т. 11, № 2. — С. 426–444.
15. **Goris N., Elbern H.** Singular vector decomposition for sensitivity analyses of tropospheric chemical scenarios // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2013. — Vol. 13, № 9. — P. 5063–5087.
16. **Канторович Л.В.** Функциональный анализ / Л.В. Канторович, Г.П. Акилов. — М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1984; Перевод: Kantorovich L.V., Akilov G.P. Functional Analysis. — Pergamon Press, 1982.
17. **Cheverda V.A.** R-pseudoinverses for compact operators in hilbert spaces: existence and stability // J. of Inverse and Ill-Posed Problems. — 1995. — Vol. 3, № 2. — P. 131–148.

18. **Argyros I.K.** Local convergence theorems of newton's method for nonlinear equations using outer or generalized inverses // Czechoslovak Mathematical Journal. — 2000. — Vol. 50, iss. 3. — P. 603–614.
19. **Пененко А.В.** Согласованные численные схемы для решения нелинейных обратных задач идентификации источников градиентными алгоритмами и методами Ньютона–Канторовича // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2018. — Т. 21, № 1. — С. 99–116; Перевод: Penenko A.V. Consistent numerical schemes for solving nonlinear inverse source problems with gradient-type algorithms and Newton–Kantorovich methods // Numerical Analysis and Applications. — 2018. — Vol. 11, № 1. — P. 73–88.
20. **Zhang H., Linford J.C., Sandu A., and Sander R.** Chemical mechanism solvers in air quality models // Atmosphere. — 2011. — Vol. 2, № 3. — P. 510–532.
21. **Вайникко Г.М., Веретенников А.Ю.** Итерационные процедуры в некорректных задачах. — М.: Наука, 1986.
22. GNU Scientific Library Reference Manual Edition 2.2.1, for GSL Version 2.2.1, 2009. — https://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/index_old.html.
23. **Stockwell W.R.** Comment on “simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm” by R.K. Srivastava et al. / W.R. Stockwell, W.S. Goliff // J. of Geophysical Research. — 2002. — Vol. 107, № D22. — P. 4643–4650.
24. **Visscher A.De.** Air Dispersion Modeling: Foundations and Applications. — JOHN WILEY & SONS INC, 2013.
25. **Shapiro B.** xCellerator User's Guide, 2012. — <http://xlr8r.info/usersguide/index.html>.
26. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H. et al.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmospheric Chemistry and Physics Discussions. — 2014. — Vol. 14, № 23. — P. 32233–32323.
27. **Schaap M., Roemer M., Sauter F., Boersen G., Timmermans R., and Bultjes P.G.H.** Lotos-euros documentation. — 2005. — (techreport: B&O / 297 / TNO report).

Поступила в редакцию 26 февраля 2018 г.

После доработки 24 мая 2018 г.

Принята к публикации 5 октября 2018 г.

Литература в транслитерации

1. **Vasiliev F.P.** Metody resheniya ekstremal'nykh zadach. — М.: Nauka, 1981.
2. **Alifanov O.M.** Ekstremal'nye metody resheniya nekorrektnykh zadach i ikh prilozheniya k obratnym zadacham teploobmena / O.M. Alifanov, E.A. Artyukhin, S.V. Romyancev. — М.: Nauka, 1988; Перевод: Alifanov O.M., Artiukhin E.A., and Rumiantsev S.V. Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems With Applications to Inverse Heat Transfer Problems. — Begell House, 1995.
3. **Lions Zh.-L.** Optimal'noe upravlenie sistemami, opisyyaemyimi uravneniyami s chastnymi proizvodnymi / R.V. Gambrilidze. — М.: Mir, 1972; Перевод: Lions J. Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations. — Berlin: Springer-Verlag, 1971.
4. **Shutyaev V.P.** The properties of control operators in one problem on data control and algorithms for its solution // Mathematical Notes. — 1995. — Vol. 57, № 6. — P. 668–671.
5. **Marchuk G.I.** O postanovke nekotorykh obratnykh zadach // DAN SSSR. — 1964. — Т. 156, № 3. — С. 503–506.
6. **Marchuk G.I.** Sopryazhennyye uravneniya i analiz slozhnykh sistem. — М.: Nauka, 1992; Перевод: Marchuk G.I. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. — Netherlands: Springer, 1995.

7. **Issartel J.-P.** Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2003. — Vol. 3, № 6. — P. 2111–2125.
8. **Issartel J.-P.** Emergence of a tracer source from air concentration measurements, a new strategy for linear assimilation // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2005. — Vol. 5, № 1. — P. 249–273.
9. **Ustinov E.A.** Adjoint sensitivity analysis of atmospheric dynamics: Application to the case of multiple observables // *J. of the Atmospheric Sciences*. — 2001. — Vol. 58, № 21. — P. 3340–3348.
10. **Bennett A.F.** *Inverse Methods in Physical Oceanography*. — Cambridge: Cambridge University Press, 1992. — (Cambridge Monographs on Mechanics).
11. **Iglesias M.A., Dawson C.** An iterative representer-based scheme for data inversion in reservoir modeling C. Dawson // *Inverse Problems*. — 2009. — Vol. 25, № 3. — P. 1–34.
12. **Le Dimet F.X., Souopgui I., Titaud O. et al.** Toward the assimilation of images // *Nonlinear Processes in Geophysics*. — 2015. — Vol. 22, № 1. — P. 15–32. — <http://www.nonlin-processes-geophys.net/22/15/2015/npg-22-15-2015.pdf>.
13. **Penenko A.V.** O reshenii obratnoy koeffitsientnoy zadachi teploprovodnosti metodom proekcii gradienta / A.V. Penenko // *Sibirskie elektronnyye matematicheskie izvestiya*. — 2010. — T. 23. — S. 178–198. — (Sb. Tr. Pervoy mezhdunarodnoy molodezhnoy shkoly-konferencii “Teoriya i chislennyye metody resheniya obratnykh i nekorrektnykh zadach. Chast’ I”).
14. **Penenko A.V., Nikolaev S.V., Golushko S.K. i dr.** Chislennyye algoritmy identifikatsii koeffitsienta diffuzii v zadachakh tkanevoy inzhenerii // *Mat. biol. i bioinf.* — 2016. — T. 11, № 2. — S. 426–444.
15. **Goris N., Elbern H.** Singular vector decomposition for sensitivity analyses of tropospheric chemical scenarios // *Atmospheric Chemistry and Physics*. — 2013. — Vol. 13, № 9. — P. 5063–5087.
16. **Kantorovich L.V.** Funktsional’nyy analiz / L.V. Kantorovich, G.P. Akilov. — M.: Nauka. Glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury, 1984; Perevod: Kantorovich L.V., Akilov G.P. *Functional Analysis*. — Pergamon Press, 1982.
17. **Cheverda V.A.** R-pseudoinverses for compact operators in hilbert spaces: existence and stability // *J. of Inverse and Ill-Posed Problems*. — 1995. — Vol. 3, № 2. — P. 131–148.
18. **Argyros I.K.** Local convergence theorems of newton’s method for nonlinear equations using outer or generalized inverses // *Czechoslovak Mathematical Journal*. — 2000. — Vol. 50, iss. 3. — P. 603–614.
19. **Penenko A.V.** Soglasovannyye chislennyye skhemy dlya resheniya nelineynykh obratnykh zadach identifikatsii istochnikov gradientnymi algoritmami i metodami N’yutona–Kantorovicha // *Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie.* — Novosibirsk, 2018. — T. 21, № 1. — S. 99–116; Perevod: Penenko A.V. Consistent numerical schemes for solving nonlinear inverse source problems with gradient-type algorithms and Newton–Kantorovich methods // *Numerical Analysis and Applications*. — 2018. — Vol. 11, № 1. — P. 73–88.
20. **Zhang H., Linford J.C., Sandu A., and Sander R.** Chemical mechanism solvers in air quality models // *Atmosphere*. — 2011. — Vol. 2, № 3. — P. 510–532.
21. **Vainikko G.M., Veretennikov A.Yu.** Iteratsionnyye procedury v nekorrektnykh zadachakh. — M.: Nauka, 1986.
22. GNU Scientific Library Reference Manual Edition 2.2.1, for GSL Version 2.2.1, 2009. — https://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/index_old.html.
23. **Stockwell W.R.** Comment on “simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm” by R.K. Srivastava et al. / W.R. Stockwell, W.S. Goliff // *J. of Geophysical Research*. — 2002. — Vol. 107, № D22. — P. 4643–4650.
24. **Visscher A.De.** *Air Dispersion Modeling: Foundations and Applications*. — JOHN WILEY & SONS INC, 2013.

25. **Shapiro B.** xCellerator User's Guide, 2012. — <http://xlr8r.info/usersguide/index.html>.
26. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H. et al.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmospheric Chemistry and Physics Discussions. — 2014. — Vol. 14, № 23. — P. 32233–32323.
27. **Schaap M., Roemer M., Sauter F., Boersen G., Timmermans R., and Builtjes P.G.H.** Lotos-euros documentation. — 2005. — (techreport: B&O / 297 / TNO report).

