

УДК 517.988, 519.62

Согласованные численные схемы для решения нелинейных обратных задач идентификации источников градиентными алгоритмами и методами Ньютона–Канторовича*

А.В. Пененко

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук,
просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090
E-mail: a.penenko@yandex.ru

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.

Рассмотрены алгоритмы решения обратной задачи идентификации источников для систем нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений продукции–деструкции. Построены согласованные, в смысле тождества Лагранжа, численные схемы для решения прямых и сопряженных задач. На основе сопряженных уравнений построен оператор чувствительности и его дискретный аналог, связывающий возмущения искомых параметров модели с возмущениями измеряемых величин. Этот оператор позволяет получить семейство квазилинейных операторных уравнений, связывающих искомые величины и данные обратной задачи. Для решения таких уравнений можно применять методы ньютоновского типа. В работе приводится численное сравнение эффективности градиентных алгоритмов на основе согласованных и несогласованных численных схем, а также алгоритма Ньютона–Канторовича при решении обратной задачи идентификации источника в нелинейной модели Лоренца.

DOI: 10.15372/SJNM20180107

Ключевые слова: обратная задача идентификации источников, метод Ньютона–Канторовича, градиентный алгоритм, сопряженные уравнения, оператор чувствительности, согласованные численные схемы.

Penenko A.V. Consistent numerical schemes for solving nonlinear inverse source problems with the gradient-type algorithms and the Newton–Kantorovich methods // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2018. — Vol. 21, № 1. — P. 99–116.

The algorithms of solving the inverse source problem for systems of the production–destruction equations are considered. Consistent in the sense of the Lagrangian identity numerical schemes for solving direct and conjugate problems have been built. With the adjoint equations, the sensitivity operator and its discrete analogue have been constructed. It links the measured values perturbations with the perturbations of the model parameters. This operator transforms the inverse problem to a quasilinear form and allows applying the Newton–Kantorovich methods to it. The paper provides a numerical comparison of the gradient algorithms based on the consistent and inconsistent numerical schemes and the Newton–Kantorovich algorithm applied to solving the inverse source problem for the nonlinear Lorenz model.

Keywords: inverse source problem, Newton–Kantorovich method, gradient-type algorithm, adjoint equations, sensitivity operator, consistent numerical schemes.

*Работа поддержана программами Президиума РАН (I.33П и II.2П/I.3-3), проектом МК-8214.2016.1 и РФФИ (проект № 17-01-00137).

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 уточнить на основе поступающих данных измерений для получения более точного прогноза. Вследствие высокой общности и простоты реализации для численного решения таких обратных задач часто используются алгоритмы минимизации некоторого целевого функционала [1, 2], пришедшие из теории оптимального управления [3]. Так, в методах, называемых “4DVAR с сильными ограничениями”, оптимизационным методом решаются обратные задачи о нахождении начального состояния, а в методах со “слабыми ограничениями” — об идентификации источников (см. обзор [4]). В [5] в контексте вариационного усвоения данных для моделей метеорологии рассматриваются в том числе и коэффициентные обратные задачи. Градиент целевого функционала обычно строится с помощью специальной сопряженной задачи. Используются и безградиентные методы минимизации, например генетические алгоритмы [6]. В связи с вариационным подходом стоит упомянуть операторы управления [7], 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 [8, 9]. Она состоит в сведении обратной задачи к системе уравнений с матрицей, определяемой набором сопряженных функций, соответствующих конечному числу различных линейных функционалов от функции состояния. В [10] данный подход применен к задаче поиска источников для линейной модели переноса примесей в атмосфере. До распространения технологий параллельных вычислений недостатком подхода было то, что требуется вычислять не одну сопряженную функцию, как в вариационных алгоритмах, а целый их набор. В частности, в [11] для исследования чувствительности модели предложено собрать все сопряженные уравнения в единую матричную систему. С распространением параллельных вычислений все требуемые сопряженные задачи можно вычислить параллельно без перехода к матричной системе, что упрощает отладку алгоритмов. Однако для работы с изображениями высокого разрешения, где значение каждого пикселя является результатом измерения, вычислительных мощностей на данном этапе развития вычислительной техники может быть недостаточно. Поэтому для работы в другом, более информативном базисе, нежели тот, что определяется исходной системой наблюдений (функционалов), мы от матрицы чувствительности переходим к оператору чувствительности. В работе [12] такой подход был использован при исследовании обратной коэффициентной задачи теплопроводности с данными в виде функций изменения температуры на поверхности среды, а в [13] — для исследования и решения обратной коэффициентной диффузионной задачи с данными в виде томографических снимков распределения полей концентраций. В данной работе мы применим этот подход к обратной задаче идентификации источников для системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции–деструкции. Получившееся операторное уравнение будем решать методом Ньютона [14]. Многие авторы (см. например, [5, 15, 16]) подчеркивают важность согласованности численных схем для решения прямых и сопряженных задач в смысле тождества Лагранжа. Мы также будем учитывать этот фактор при построении численных алгоритмов.

Полученные схемы применим к модели Лоренца [17], которая соответствует процессам нелинейной конвекции, возникающим при моделировании процессов в метеорологии, океанографии и т. д. В силу хаотического поведения она часто используется для демонстрации схем усвоения данных в [6, 18] и в других работах.

Целью данной работы является представление согласованного набора схем для решения прямых и сопряженных задач в рамках обратной задачи идентификации источников (правых частей) для систем нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции–деструкции, необходимых для реализации градиентных алгоритмов и алгоритмов типа Ньютона, а также численное сравнение эффективности этих алгоритмов на примере модели Лоренца.

2. Постановка задачи

Рассмотрим временной интервал $[0, T]$ и задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции–деструкции (см., например, [19]):

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

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

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

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

Зададим набор моментов времени $\Theta = \{\theta^m\}_{m=1}^M \subset [0, T]$, $\theta^1 > 0$, $\theta^M = T$, и набор матриц $\{H_\xi \in \mathbb{R}^{N_c \times M} \mid \xi = 1, \dots, \Xi\}$. Определим билинейное отображение, соответствующее одному результату измерений, оператор измерений H , а также оператор A , ставящий в соответствие параметрам прямой задачи результат применения H к ее решению:

$$\langle \cdot, \cdot \rangle_\Theta : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c \times M} \times \Phi \rightarrow \mathbb{R} \\ \{h, \vec{\varphi}\} \mapsto \sum_{m=1}^M h^m \cdot \vec{\varphi}(\theta^m) \end{array} \right\}, \quad H : \left\{ \begin{array}{l} \Phi \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ \vec{\varphi} \mapsto \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle H_\xi, \vec{\varphi} \rangle_\Theta e_\xi \end{array} \right\}, \quad A : \left\{ \begin{array}{l} \mathbb{R}^{N_c} \times F \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ \{\vec{\varphi}^0, \vec{r}\} \mapsto H \vec{\varphi}[\vec{\varphi}^0, \vec{r}] \end{array} \right\},$$

где \cdot, \cdot — скалярное произведение в \mathbb{R}^{N_c} , h^m — m -й столбец матрицы h , $e_\xi \in \mathbb{R}^\Xi$ — вектор, у которого на ξ -м месте стоит 1, а на остальных — нули. Например, результат измерения l -го компонента функции состояния $\vec{\varphi}$ в момент времени θ^m можно записать в виде $\varphi_l(\theta^m) = \langle h, \vec{\varphi} \rangle_\Theta$, где $h \in \mathbb{R}^{N_c \times M}$ — матрица, у которой все столбцы кроме m -го нулевые, а m -й столбец — это вектор, у которого на l -м месте стоит 1, а на остальных — нули.

Зададим некоторое значение \vec{r}^* , которое назовем “точным решением”, и определим вектор данных измерений

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

где $\delta \vec{I}$ — погрешность измерений. Она неизвестна, но известна некоторая информация о ней, например норма $|\delta \vec{I}| = \delta$.

Определение 2. Обратной задачей идентификации источника назовем задачу определения \vec{r}^* по $\vec{\varphi}^0$, \vec{I} , δ и (3).

3. Построение оператора чувствительности

Лемма 1. Пусть $\vec{\varphi} = \vec{\varphi}[\vec{\varphi}^0, \vec{r}]$, $\vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi} = \vec{\varphi}[\vec{\varphi}^0 + \delta\vec{\varphi}^0, \vec{r} + \delta\vec{r}]$, тогда для любой матрицы $h \in \mathbb{R}^{N_c \times M}$ верно соотношение

$$\langle h, \delta\vec{\varphi} \rangle_{\Theta} = \delta\vec{\varphi}(0+) \vec{\Psi}(0+) + \int_0^T \delta\vec{r} \vec{\Psi} dt, \quad (4)$$

где $\vec{\Psi}$ — решение сопряженной задачи:

$$-\frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial t} + (\text{diag}(P(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi})) + \bar{\nabla}P(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi})^* \text{diag}(\vec{\varphi}) - \bar{\nabla}\Pi(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi})^*) \vec{\Psi} = 0, \quad (5)$$

$$t \in [\theta^m, \theta^{m+1}], \quad m = 0, \dots, M-1,$$

$$\left[\vec{\Psi} \right]_{t=\theta^m} = -h^m, \quad m = 1, \dots, M, \quad (6)$$

$$\vec{\Psi}(T+) = \vec{0}, \quad (7)$$

где $\theta^0 = 0$, выражения $f(t-)$ и $f(t+)$ обозначают пределы снизу и сверху соответственно, $[f]_{t=\theta^m} = f(\theta^m+) - f(\theta^m-)$ — скачок функции f , $\text{diag}(x)$ — диагональную матрицу с элементами вектора x на диагонали, $*$ — операцию транспонирования, $\bar{\nabla}$ — 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 $\vec{\varphi}, \delta\vec{\varphi} \in \mathbb{R}^{N_c}$:

$$S(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}) - S(t, \vec{\varphi}) = \bar{\nabla}S(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi}) \delta\vec{\varphi}. \quad (8)$$

Обозначим через $\bar{\nabla}_i S_l(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi})$ элемент результирующей матрицы в l -й строке и i -м столбце. Для краткости в (5) опущен аргумент t у функций $\vec{\Psi}$, $\vec{\varphi}$, $\delta\vec{\varphi}$.

Доказательство. Запишем уравнение в вариациях для (1) в векторной форме, опустим аргумент t у функций $\vec{\Psi}$, $\vec{\varphi}$, $\delta\vec{\varphi}$ и используем (8):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta\vec{\varphi}}{\partial t} + \text{diag}(P(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi})) (\vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}) - \text{diag}(P(t, \vec{\varphi})) \vec{\varphi} &= \bar{\nabla}\Pi(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi}) \delta\vec{\varphi} + \delta\vec{r}, \\ \frac{\partial \delta\vec{\varphi}}{\partial t} + \text{diag}(P(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi})) \delta\vec{\varphi} + \text{diag}(\bar{\nabla}P(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi}) \delta\vec{\varphi}) \vec{\varphi} &= \bar{\nabla}\Pi(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi}) \delta\vec{\varphi} + \delta\vec{r}. \end{aligned} \quad (9)$$

Скалярно домножим (9) на произвольную достаточно гладкую вектор-функцию $\vec{\Psi}(t) \in \mathbb{R}^{N_c}$ на интервале $[\theta^m, \theta^{m+1}]$:

$$\begin{aligned} \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} \left(\frac{\partial \delta\vec{\varphi}}{\partial t} + (\text{diag}(P(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi})) - \bar{\nabla}\Pi(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi})) \delta\vec{\varphi} \right) \vec{\Psi} dt \\ = \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} (-\text{diag}(\bar{\nabla}P(t, \vec{\varphi} + \delta\vec{\varphi}, \vec{\varphi}) \delta\vec{\varphi}) \vec{\varphi}) \cdot \vec{\Psi} dt + \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} \delta\vec{r} \cdot \vec{\Psi} dt. \end{aligned} \quad (10)$$

Пусть $\delta\varphi_i$ — i -й элемент $\delta\vec{\varphi}$, тогда верны тождества:

$$\begin{aligned}
 & (\text{diag} (\bar{\nabla} P(t, \bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi}, \bar{\varphi}) \delta \bar{\varphi}) \bar{\varphi}) \cdot \bar{\Psi} = \sum_l \left(\sum_i \bar{\nabla}_i P_l(t, \bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi}, \bar{\varphi}) \delta \varphi_i \right) \varphi_l \Psi_l \\
 & = \sum_i \left(\sum_l \bar{\nabla}_i P_l(t, \bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi}, \bar{\varphi}) \varphi_l \Psi_l \right) \delta \varphi_i = \left(\bar{\nabla} P(t, \bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi}, \bar{\varphi}) * \text{diag}(\bar{\varphi}) \bar{\Psi} \right) \cdot \delta \bar{\varphi}, \\
 & \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} \frac{\partial \delta \bar{\varphi}}{\partial t} \cdot \bar{\Psi} dt = \delta \bar{\varphi} \cdot \bar{\Psi} \Big|_{t=\theta^m}^{t=\theta^{m+1}} + \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} \delta \bar{\varphi} \cdot \left(-\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \right) dt.
 \end{aligned}$$

Из (10) следует

$$\begin{aligned}
 & \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} \delta \bar{\varphi} \cdot \left(-\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} + (\text{diag} (P(t, \bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi})) - \bar{\nabla} \Pi(t, \bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi}, \bar{\varphi})^*) \bar{\Psi} \right) dt + \\
 & \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} \delta \bar{\varphi} (\bar{\nabla} P(t, \bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi}, \bar{\varphi}) * \text{diag}(\bar{\varphi})) \bar{\Psi} dt + \delta \bar{\varphi} \bar{\Psi} \Big|_{t=\theta^m}^{t=\theta^{m+1}} = \int_{\theta^m}^{\theta^{m+1}} \delta \bar{r} \cdot \bar{\Psi} dt. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Если $\bar{\Psi}$ удовлетворяет (5), то, суммируя тождество (11) по $m = 0, \dots, M - 1$, получим

$$\delta \bar{\varphi}(T-) \cdot \bar{\Psi}(T-) - \sum_{m=1}^{M-1} \delta \bar{\varphi}(\theta^m) \cdot [\bar{\Psi}]_{t=\theta^m} - \delta \bar{\varphi}(0+) \cdot \bar{\Psi}(0+) = \int_0^T \delta \bar{r} \cdot \bar{\Psi} dt. \quad (12)$$

Пусть выполнено условие (7), тогда в силу непрерывности $\delta \bar{\varphi}(T-)$ и $\theta^M = T$:

$$\delta \bar{\varphi}(T-) \cdot \bar{\Psi}(T-) = -\delta \bar{\varphi}(T) \cdot (\bar{\Psi}(T+) - \bar{\Psi}(T-)) = -\delta \bar{\varphi}(T) \cdot [\bar{\Psi}]_{t=\theta^M}. \quad (13)$$

Учитывая в (12) соотношения (6) и (13), получим требуемое. \square

Обозначим решение сопряженной задачи (5)–(7) через $\bar{\Psi} [\bar{\varphi}^0, \bar{r}, \delta \bar{\varphi}^0, \delta \bar{r}, h]$.

Следствие 1. *Вариация функционала*

$$J(\bar{\varphi}^0, \bar{r}) = \|H\bar{\varphi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}] - I\|_{\mathbb{R}^\Xi}^2 \quad (14)$$

дается выражением

$$\begin{aligned}
 J(\bar{\varphi}^0 + \delta \bar{\varphi}^0, \bar{r} + \delta \bar{r}) - J(\bar{\varphi}^0, \bar{r}) & = \delta \bar{\varphi}^0 \cdot \bar{\Psi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}, 0, 0, h](0+) + \int_0^T \delta \bar{r} \cdot \bar{\Psi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}, 0, 0, h] dt + \\
 & \delta \bar{\varphi}^0 \cdot \left(\bar{\Psi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}, \delta \bar{\varphi}^0, \delta \bar{r}, h](0+) - \bar{\Psi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}, 0, 0, h](0+) \right) + \\
 & \int_0^T \delta \bar{r} \cdot \left(\bar{\Psi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}, \delta \bar{\varphi}^0, \delta \bar{r}, h] - \bar{\Psi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}, 0, 0, h] \right) dt + \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle H_\xi, \delta \bar{\varphi} \rangle_\Theta^2, \quad (15)
 \end{aligned}$$

где $h = 2 \sum_{\xi=1}^{\Xi} (\langle H_\xi, \bar{\varphi} \rangle_\Theta - I_\xi) H_\xi$, $\bar{\varphi} = \bar{\varphi}[\bar{\varphi}^0, \bar{r}]$, $\bar{\varphi} + \delta \bar{\varphi} = \bar{\varphi}[\bar{\varphi}^0 + \delta \bar{\varphi}^0, \bar{r} + \delta \bar{r}]$.

Доказательство. По определению целевого функционала (14) и оператора измерений H :

$$J(\vec{\varphi}^0 + \delta\vec{\varphi}^0, \vec{r} + \delta\vec{r}) - J(\vec{\varphi}^0, \vec{r}) = \left\langle 2 \sum_{\xi=1}^{\Xi} (\langle H_{\xi}, \vec{\varphi} \rangle_{\Theta} - I_{\xi}) H_{\xi}, \delta\vec{\varphi} \right\rangle_{\Theta} + \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle H_{\xi}, \delta\vec{\varphi} \rangle_{\Theta}^2.$$

Далее воспользуемся леммой 1 и получим требуемое. \square

При достаточной гладкости вектор-функций продукции и деструкции можно показать, что слагаемые во 2-й и 3-й строках (15) являются слагаемыми второго порядка малости относительно $\{\delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}\}$ и, следовательно, $\{\vec{\Psi}[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, 0, 0, h](0+), \vec{\Psi}[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, 0, 0, h]\}$ могут быть использованы в качестве градиентов функционала $J(\vec{\varphi}^0, \vec{r})$.

Докажем теорему, которая позволит получить (как следствие) семейство квазилинейных операторных уравнений, связывающих искомые величины и данные обратной задачи (3).

Теорема 1. Пусть $V \subset \mathbb{R}^{\Xi}$ — некоторое подпространство в \mathbb{R}^{Ξ} , а v_1, \dots, v_S — ортонормированный базис в V . Для любых $\vec{r} + \delta\vec{r}, \vec{r} \in F$, и $\vec{\varphi}^0 + \delta\vec{\varphi}^0, \vec{\varphi}^0 \in \mathbb{R}^{N_c}$, верно соотношение

$$\text{Pr}_V A(\vec{\varphi}^0 + \delta\vec{\varphi}^0, \vec{r} + \delta\vec{r}) - \text{Pr}_V A(\vec{\varphi}^0, \vec{r}) = M_V^0[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}] \delta\vec{\varphi}^0 + M_V[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}] \delta\vec{r},$$

где Pr_V — ортогональный проектор на V ,

$$M_V^0[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}] : \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow V \\ \vec{z} \mapsto \left(\sum_{s=1}^{\dim V} v_s \otimes \left(\vec{\Psi}[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}, \tilde{H}_s](0+) \right)^* \right) \vec{z} \end{cases}, \quad (16)$$

$$M_V[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}] : \begin{cases} F \rightarrow V \\ \vec{z} \mapsto \int_0^T \left(\sum_{s=1}^{\dim V} v_s \otimes \left(\vec{\Psi}[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}, \tilde{H}_s](t) \right)^* \right) \vec{z}(t) dt \end{cases}. \quad (17)$$

Здесь \otimes — тензорное произведение, $\tilde{H}_s = \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle e_{\xi}, v_s \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}} H_{\xi}$ и $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}}$ — евклидово скалярное произведение в \mathbb{R}^{Ξ} .

Доказательство. По определению оператора измерений и проектора на ортонормированную систему имеем

$$\text{Pr}_V (A(\vec{\varphi}^0 + \delta\vec{\varphi}^0, \vec{r} + \delta\vec{r}) - A(\vec{\varphi}^0, \vec{r})) = \sum_{s=1}^{\dim V} \left\langle \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle e_{\xi}, v_s \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}} H_{\xi}, \delta\vec{\varphi} \right\rangle_{\Theta} v_s = \sum_{s=1}^{\dim V} \langle \tilde{H}_s, \delta\vec{\varphi} \rangle_{\Theta} v_s,$$

где $\tilde{H}_s = \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle e_{\xi}, v_s \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}} H_{\xi}$. В силу леммы 1 для $\vec{\Psi}(\tilde{H}_s) = \vec{\Psi}[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\varphi}^0, \delta\vec{r}, \tilde{H}_s]$

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\dim V} \langle \tilde{H}_s, \delta\vec{\varphi} \rangle_{\Theta} v_s &= \sum_{s=1}^{\dim V} \left(\delta\vec{\varphi}^0 \vec{\Psi}(\tilde{H}_s)(0+) + \int_0^T \delta\vec{r} \vec{\Psi}(\tilde{H}_s) dt \right) v_s \\ &= \left(\sum_{s=1}^{\dim V} v_s \otimes \left(\vec{\Psi}(\tilde{H}_s)(0+) \right)^* \right) \delta\vec{\varphi}^0 + \int_0^T \left(\sum_{s=1}^{\dim V} v_s \otimes \left(\vec{\Psi}(\tilde{H}_s) \right)^* \right) \delta\vec{r} dt. \end{aligned}$$

Вводя обозначения (16), (17), получаем требуемое. \square

Таким образом, любая пара оператора измерений и “неопределенностей” модели (функций управления) порождает свой оператор чувствительности, который является характеристикой данной обратной задачи. В частности, его свойства можно изучать методами сингулярного разложения [12, 13]. Если данных относительно немного, то для вычисления оператора можно использовать все пространство \mathbb{R}^Ξ . Если же данные — это, например, снимки высокого разрешения, то для уменьшения размерности задачи можно использовать проекцию на некоторое подпространство. В частности, в [13] была использована проекция на старшие левые сингулярные векторы оператора.

Следствие 2. Для любого $\vec{r} \in F$ и подпространства $V \subset \mathbb{R}^\Xi$ выполняется тождество

$$\begin{aligned} \text{Pr}_V (I - A(\vec{\varphi}^0, \vec{r})) &= M_V[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, 0, \vec{r}^* - \vec{r}] (\vec{r}^* - \vec{r}) + \text{Pr}_V \delta \vec{I} \\ &= M_V[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, 0, 0] (\vec{r}^* - \vec{r}) + (M_V[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, 0, \vec{r}^* - \vec{r}] - M_V[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, 0, 0]) (\vec{r}^* - \vec{r}) + \text{Pr}_V \delta \vec{I}. \end{aligned} \quad (18)$$

В силу конечности сумм и при достаточной гладкости вектор-функций продукции и деструкции можно показать, что второе слагаемое в (18) является слагаемым второго порядка малости, поэтому $M_V[\vec{\varphi}^0, \vec{r}, 0, 0]$ может быть использована в качестве производной Фреше $\text{Pr}_V A(\vec{\varphi}^0, \vec{r})$.

4. Согласованные дискретно-аналитические схемы

Для численного решения задачи введем расчетную сетку $\omega_t = \{t^j\}_{j=1}^{N_t} \subset [0, T]$ с интервалами равной длины Δt , где $t^1 = 0$ и $t^{N_t} = T$. Все последующие выкладки можно также провести для переменного шага по времени. Построим согласованные, в смысле тождества Лагранжа, дискретные аналоги алгоритмических конструкций из предыдущего пункта.

С помощью локально-сопряженных задач [20] можно получить эквивалентное выражение для (1), (2) на сетке ω_t при $l = 1, \dots, N_c$:

$$\varphi_l(t^{j+1}) = \varphi_l(t^j) \varphi_l^*(t^j) + \int_{t^j}^{t^{j+1}} (\Pi_l(\xi, \vec{\varphi}(\xi)) + r_l(\xi)) \varphi_l^*(\xi) d\xi, \quad j = 1, \dots, N_t - 1, \quad (19)$$

$$-\frac{\partial \varphi_l^*}{\partial t}(t) + P_l(t, \vec{\varphi}(t)) \varphi_l^*(t) = 0, \quad t \in [t^j, t^{j+1}], \quad \varphi_l^*(t^{j+1}) = 1, \quad j = 1, \dots, N_t - 1, \quad (20)$$

$$\varphi_l(t^1) = \varphi_l^0. \quad (21)$$

Если аппроксимировать источник r_l на каждом интервале $[t^j, t^{j+1}]$ значением r_l^j и решение сопряженной задачи (20) решением с постоянным коэффициентом $P_c(t^j, \varphi(t^j))$, то из (19)–(21) можно получить одностадийную явную схему с неотрицательными решениями при неотрицательных входных данных и неотрицательных вектор-функциях продукции–деструкции, известную как Quasi Steady State Approximation (QSSA) [21]:

$$\phi_l^{j+1} = \phi_l^j e^{-P_l(t^j, \phi^j) \Delta t} + \int_0^{\Delta t} e^{-P_l(t^j, \phi^j)(\Delta t - \xi)} d\xi (\Pi_l(t^j, \phi^j) + r_l^j), \quad j = 1, \dots, N_t - 1, \quad (22)$$

$$\phi_l^1 = \phi_l^0, \quad (23)$$

где $l = 1, \dots, N_c$. Схема имеет первый порядок. Теоретическое исследование этой схемы, анализ ее достоинств и недостатков, а также различные варианты ее усовершенствования (усложнения) содержатся в [22]. Схема была выбрана для данного исследования

вследствие ее простоты, явного характера вычислений, возможности автоматически сохранять положительность концентраций химических веществ для моделей трансформации химических веществ в атмосфере, а также широкой распространенности. В [23] для численного решения обратной задачи нахождения начального состояния используются схемы, полученные из (22) аппроксимацией экспонент полиномами. Обзор использования различных алгоритмов в задачах моделирования процессов трансформации химических веществ в атмосфере, а также анализ их сильных и слабых сторон содержится в [19].

Для работы с жесткими системами (а также вследствие того, что достоверное вычисление экспонент на ЭВМ возможно только со значениями аргумента из определенного интервала) схему аппроксимируют, разделяя вещества на группы “быстрых”, “средних” и “медленных” в зависимости от “времени жизни”:

$$\phi_l^{j+1} = \phi_l^j L(P_l(t^j, \vec{\phi}^j)) + G(P_l(t^j, \vec{\phi}^j)) (\Pi_l(t^j, \vec{\phi}^j) + r_l^j), \quad j = 1, \dots, N_t - 1, \quad (24)$$

$$\phi_l^1 = \phi_l^0, \quad (25)$$

где $l = 1, \dots, N_c$ и

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

Лемма 2. Пусть $\vec{\phi}^{j+1}$, $\vec{\phi}^j + \delta\vec{\phi}^j$ — результаты вычисления по схеме (22), соответствующие значениям функции состояния на предыдущем шаге $\vec{\phi}^j$, $\vec{\phi}^j + \delta\vec{\phi}^j$ и источникам \vec{r}^j , $\vec{r}^j + \delta\vec{r}^j$, тогда уравнение в вариациях имеет вид

$$\delta\phi_l^{j+1} = W(t^j, \vec{\phi}^j, \vec{r}^j, \vec{\phi}^j, \delta\vec{r}^j) \delta\phi_l^j + R(t^j, \vec{\phi}^j) \delta r_l^j, \quad (26)$$

где

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

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

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

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

иначе

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

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

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

Доказательство. Если $p_l^2 = p_l^1 =: p_l$, то верно тождество

$$\begin{aligned} & (a_2 L(p_l^2) + G(p_l^2)(c_2 + d_2)) - (a_1 L(p_l^1) + G(p_l^1)(c_1 + d_1)) \\ &= (a_2 - a_1) L(p_l) + G(p_l) (c_2 - c_1) + G(p_l) (d_2 - d_1), \end{aligned} \quad (27)$$

иначе верно

$$\begin{aligned} & (a_2 L(p_l^2) + G(p_l^2)(c_2 + d_2)) - (a_1 L(p_l^1) + G(p_l^1)(c_1 + d_1)) \\ &= (a_2 - a_1) L(p_l^2) + \left(a_1 \frac{L(p_l^2) - L(p_l^1)}{p_l^2 - p_l^1} + \frac{G(p_l^2) - G(p_l^1)}{p_l^2 - p_l^1} (c_2 + d_2) \right) (p_l^2 - p_l^1) + \\ & \quad G(p_l^1) (c_2 - c_1) + G(p_l^1) (d_2 - d_1). \end{aligned} \quad (28)$$

Если в (27) и (28) подставить значения

$$a_2 = \phi_l^j + \delta\phi_l^j, \quad a_1 = \phi_l^j, \quad d_2 = r_l^j + \delta r_l^j, \quad d_1 = r_l^j, \quad c_2 = \Pi_l(t^j, \vec{\phi}^j + \delta\vec{\phi}^j), \quad c_1 = \Pi_l(t^j, \vec{\phi}^j),$$

то можно заметить, что его левая часть соответствующего тождества является правой частью уравнения в вариациях для (24) и, следовательно, равна $\delta\phi_l^{j+1}$. Если воспользоваться определением (8) для P_l и Π_l , то можно получить

$$p_l^2 - p_l^1 = \bar{\nabla} P_l(t, \vec{\phi}^j + \delta\vec{\phi}^j, \vec{\phi}^j) \delta\vec{\phi}^j, \quad c_2 - c_1 = \bar{\nabla} \Pi_l(t, \vec{\phi}^j + \delta\vec{\phi}^j, \vec{\phi}^j) \delta\vec{\phi}^j,$$

откуда и следует утверждение леммы. \square

Лемма 3. Если $\vec{\phi} = \vec{\phi}[\vec{\phi}^0, \vec{r}]$, $\vec{\phi} + \delta\vec{\phi} = \vec{\phi}[\vec{\phi}^0 + \delta\vec{\phi}^0, \vec{r} + \delta\vec{r}]$, задана матрица $h \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$, то верно соотношение

$$\sum_{j=1}^{N_t} \delta\vec{\phi}^j \cdot h^j = \delta\vec{\phi}^0 \cdot \vec{\psi}^0 + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\vec{r}^j \cdot R(t^j, \vec{\phi}^j) \vec{\psi}^j, \quad (29)$$

где

$$\vec{\psi}^{j-1} = (W(t^j, \vec{\phi}^j, \vec{r}^j, \vec{\phi}^j, \delta\vec{r}^j))^* \vec{\psi}^j + h^j, \quad j = 1, \dots, N_t - 1, \quad (30)$$

$$\vec{\psi}^{N_t-1} = h^{N_t}, \quad (31)$$

h^j — столбцы матрицы h .

Доказательство. Скалярно умножая уравнение в вариациях (26) на сопряженный вектор $\vec{\psi}^j \in \mathbb{R}^{N_c}$ и суммируя по временному индексу j , получим

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

Воспользуемся соотношением

$$\sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\vec{\phi}^{j+1} \cdot \vec{\psi}^j = \sum_{l=2}^{N_t} \delta\vec{\phi}^l \cdot \vec{\psi}^{l-1} = \delta\vec{\phi}^{N_t} \cdot \vec{\psi}^{N_t-1} + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\vec{\phi}^j \cdot \vec{\psi}^{j-1} - \delta\vec{\phi}^1 \cdot \vec{\psi}^0,$$

тогда

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

Пусть выполнены (30), (31), тогда верно (29). \square

Обозначим решение сопряженной задачи (30), (31) через $\vec{\psi} [\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}, h]$.

Определение 3. Пару численных схем для решения прямой и сопряженной задачи назовем согласованными, если для них выполняется тождество, связывающее скалярное произведение вариации решения прямой задачи и произвольного вектора со скалярными произведениями вариаций параметров прямой задачи с некоторыми векторами, зависящими от решения сопряженной задачи.

По лемме таковыми являются (24), (25) и (30), (31) относительно (29). Численную схему для сопряженной задачи (30), (31) также назовем согласованной. Заметим, что сопряженную задачу (5)–(7) можно привести к виду (1) и получить аналогичную (24), (25) схему с другими P и Π . Полученная таким способом схема не будет согласована с (24), (25) относительно (29), поэтому назовем ее несогласованной.

Пусть моменты времени измерений лежат на временной сетке $\omega_\theta \subset \omega_t$, тогда из матриц измерений $\{H_\xi \in \mathbb{R}^{N_c \times M} \mid \xi = 1, \dots, \Xi\}$ можно получить набор $\{\bar{H}_\xi \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t} \mid \xi = 1, \dots, \Xi\}$, дополнив соответствующие столбцы нулевыми.

Следствие 3. Если задан функционал

$$\bar{J}(\vec{\phi}^0, \vec{r}) = \sum_{\xi=1}^{\Xi} (\langle \bar{H}_\xi, \vec{\phi} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c \times N_t}} - I_\xi)^2,$$

то

$$\begin{aligned} \bar{J}(\vec{\phi}^0 + \delta\vec{\phi}^0, \vec{r} + \delta\vec{r}) - \bar{J}(\vec{\phi}^0, \vec{r}) &= \delta\vec{\phi}^0 \cdot \vec{\psi}^0[\vec{\phi}^0, \vec{r}, 0, 0, h] + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\vec{r}^j \cdot R(t^j, \vec{\phi}^j) \vec{\psi}^j[\vec{\phi}^0, \vec{r}, 0, 0, h] + \\ &\quad \delta\vec{\phi}^0 \cdot (\vec{\psi}^0[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}, h] - \vec{\psi}^0[\vec{\phi}^0, \vec{r}, 0, 0, h]) + \\ &\quad \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta\vec{r}^j \cdot R(t^j, \vec{\phi}^j) (\vec{\psi}^j[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}, h] - \vec{\psi}^j[\vec{\phi}^0, \vec{r}, 0, 0, h]) + \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle \bar{H}_\xi, \delta\vec{\phi} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c \times N_t}}^2, \end{aligned} \quad (32)$$

где $h = 2 \sum_{\xi=1}^{\Xi} (\langle \bar{H}_\xi, \vec{\phi} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c \times N_t}} - I_\xi) \bar{H}_\xi$, $\vec{\phi} = \vec{\phi}[\vec{\phi}^0, \vec{r}]$, $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^{N_c \times N_t}}$ — евклидово скалярное произведение в $\mathbb{R}^{N_c \times N_t}$.

При переходе к пределу $\delta\vec{\phi}^j, \delta\vec{r}^j \rightarrow 0$ разделенные разности в определении S_l для (26) перейдут в производные. Построение схем для уравнения в вариациях важно при отладке алгоритмов на ЭВМ, так как для согласованных схем прямой и сопряженной задачи должно выполняться тождество (29). Если опустить при вычислениях слагаемые малости выше первого порядка, то тождество будет выполняться приближенно, и для проверки потребуется численно переходить к пределу.

Определим дискретный аналог оператора A :

$$\bar{A} : \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c} \times \mathbb{R}^{N_c \times N_t} \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ \{\vec{\phi}^0, \vec{r}\} \mapsto \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle \bar{H}_\xi, \vec{\phi} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c \times N_t}} e_\xi \end{cases}.$$

Теорема 2. Если v_1, \dots, v_S — ортонормированный базис некоторого подпространства $V \subset \mathbb{R}^\Xi$, то для любых $\vec{\phi}^0, \vec{\phi}^0 + \delta\vec{\phi}^0 \in \mathbb{R}^{N_c}$ и $\vec{r}, \vec{r} + \delta\vec{r} \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$

$$\begin{aligned} \text{Pr}_V (\bar{A}(\vec{\phi}^0 + \delta\vec{\phi}^0, \vec{r} + \delta\vec{r}) - \bar{A}(\vec{\phi}^0, \vec{r})) &= \bar{M}_V^0[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}] \delta\vec{\phi}^0 + \bar{M}_V[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}] \delta\vec{r}, \\ \bar{M}_V^0[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}] &: \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow V \\ z \mapsto (\sum_{s=1}^{\dim V} v_s \otimes (\bar{\psi}^0[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}, \tilde{H}_s])^*) \bar{z}^j \end{cases}, \\ \bar{M}_V[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}] &: \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c \times N_t} \rightarrow V \\ z \mapsto \sum_{j=1}^{N_t-1} (\sum_{s=1}^{\dim V} v_s \otimes (R(t^j, \vec{\phi}^j) \bar{\psi}^j[\vec{\phi}^0, \vec{r}, \delta\vec{\phi}^0, \delta\vec{r}, \tilde{H}_s])^*) \bar{z}^j \end{cases}, \\ \tilde{H}_s &= \sum_{\xi=1}^{\Xi} \langle e_\xi, v_s \rangle_{\mathbb{R}^\Xi} \bar{H}_\xi, \quad \vec{\phi} = \vec{\phi}[\vec{\phi}^0, \vec{r}]. \end{aligned}$$

При вычислении оператора чувствительности требуется, во-первых, параллельно решить две независимые прямые задачи, а во-вторых, параллельно решить $\dim V$ независимых сопряженных задач с различными правыми частями. Следовательно, если не учитывать время на запуск параллельных процессов, то при условии их достаточного количества вычисление оператора чувствительности занимает столько же физического времени, что и вычисление градиента. Такая вычислительная технология была реализована в [13] и в данной работе.

5. Численные эксперименты с моделью Лоренца

В качестве тестовой модели рассмотрим систему Лоренца [17]. При определенных параметрах ей свойственна хаотическая динамика, и в ее фазовом пространстве наблюдается странный аттрактор. В терминах вектор-функций продукции и деструкции имеем

$$P(t, \vec{\varphi}) = \begin{bmatrix} a \\ 1 \\ c \end{bmatrix}, \quad \Pi(t, \vec{\varphi}) = \begin{bmatrix} a\varphi_2 \\ b\varphi_1 - \varphi_1\varphi_3 \\ \varphi_1\varphi_2 \end{bmatrix}, \quad \bar{\nabla}\Pi(t, \vec{\varphi}_2, \vec{\varphi}_1) = \begin{bmatrix} 0 & a & 0 \\ b - (\varphi_1)_3 & 0 & -(\varphi_2)_1 \\ (\varphi_1)_2 & (\varphi_2)_1 & 0 \end{bmatrix},$$

где a, b, c — некоторые заданные константы, следовательно, $\bar{\nabla}P(t, \vec{\varphi}_2, \vec{\varphi}_1) = 0$.

При разработке алгоритма усвоения данных нас интересует более частная обратная задача, в которой точные измерения всей функции состояния доступны только в конце временного интервала $[0, T]$, причем источник каждой компоненты работает с постоянной мощностью на всем временном интервале:

$$M = 1, \quad \theta^M = T, \quad \Xi = 3, \quad H_\xi = e_\xi, \quad \xi = 1, \dots, \Xi, \quad \delta = 0, \quad r_l(t) = r_l, \quad t \in [0, T].$$

Следующие параметры будут общими для всех дальнейших численных экспериментов: $T = 3$, $a = 5$, $c = 1$, $\vec{\phi}^0 = \{3, 2, 15.5\}^*$, $\vec{r}^* = \{1, 1, 1\}^*$, $\vec{r}_0 = \{0, 0, 0\}^*$. Система Лоренца в зависимости от значения параметра b может находиться в нескольких режимах: при $b = b_S = 1$ в системе нет странного аттрактора, а при $b = b_C = 26$ он присутствует. В обоих случаях она является нелинейной, однако ее динамика качественно отличается.

5.1. Алгоритмы решения обратной задачи

Расчеты будем проводить в системе Wolfram Research Mathematica, используя стандартные градиентные алгоритмы оптимизации и алгоритмы Ньютона решения нелинейных уравнений, задавая в соответствующих параметрах процедуры для вычисления целевых функционалов, градиентов и операторов чувствительности.

В частности, на основе градиента целевого функционала применяется метод сопряженных градиентов Полака–Рибьера:

$$\vec{r}_{k+1} := \vec{r}_k - \alpha_k \vec{s}_k, \quad \vec{s}_k = \begin{cases} \vec{g}_l + \beta_l \vec{s}_{l-1}, & l > 1, \\ \vec{g}_l, & l = 1, \end{cases} \quad \vec{g}_k = -\nabla \bar{J}(\vec{\phi}^0, \vec{r}_k), \quad \beta_k = \frac{\langle \vec{g}_k, \vec{g}_k - \vec{g}_{k-1} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c}}}{\langle \vec{g}_{k-1}, \vec{g}_{k-1} \rangle_{\mathbb{R}^{N_c}}},$$

где $\vec{r}_k \in \mathbb{R}^{N_c}$ — итерации алгоритма, параметр спуска α_k определяется на основе правила Вольфе [24].

На основе оператора чувствительности можно построить итерационные методы ньютоновского типа:

$$\vec{r}_{k+1} = \vec{r}_k + \gamma \bar{M}_V[\vec{\phi}^0, \vec{r}_k, 0, 0]^{-1} \text{Pr}_V(I - \bar{A}(\vec{\phi}^0, \vec{r}_k)), \quad (33)$$

где γ — некоторый параметр регуляризации [25]. Если матрица оператора $\bar{M}_V[\vec{\phi}^0, \vec{r}_k, 0, 0]$ плохо обусловлена, то возникает проблема ее обращения. Например, в [13] она решалась использованием r -псевдообратных операторов увеличивающейся размерности.

5.2. Численное исследование сходимости

Исследуем численно свойства согласованных схем (24), (25) и (30), (31) и несогласованной схемы решения сопряженной задачи.

На рисунках 1а и 2а представлены траектории системы в фазовом пространстве при $b = b_S$ и $b = b_C$. Время T выбрано так, чтобы в хаотическом режиме наблюдалось первое существенное расхождение траекторий. С увеличением этого периода расхождение увеличится [18].

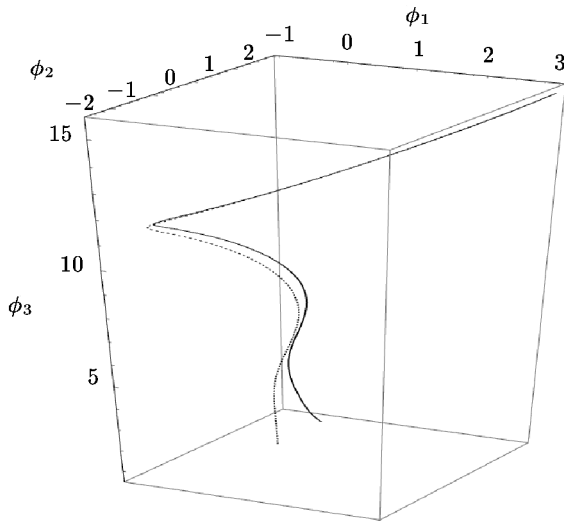


Рис. 1а. Траектории с одним $\vec{\phi}^0$ для источников \vec{r}^* и \vec{r}^0 ; $b = b_S$

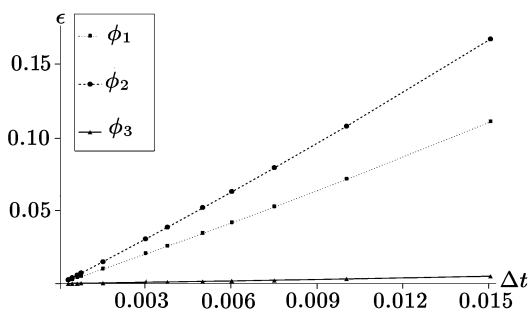


Рис. 1б. Относительные ошибки решений прямой задачи; $b = b_S$

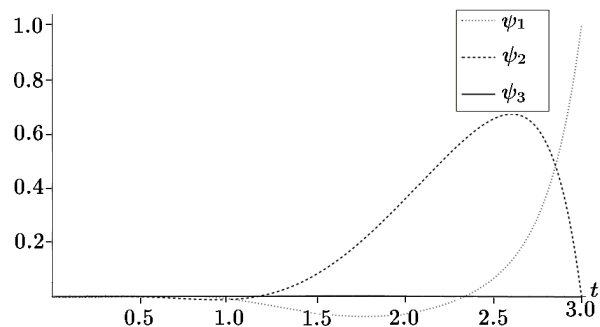


Рис. 1в. Решение сопряженной задачи для $H = e_1$; $b = b_S$

На рис. 1б и 2б представлены относительные ошибки в зависимости от шага по времени решений прямой задачи по сравнению с решением для $N_t = 102400$ ($\Delta t = 0.00003$). Для $b = b_S$ (рис. 1б) наблюдается линейное убывание ошибки по всем компонентам, а для $b = b_C$ наблюдается нелинейное изменение ошибки (рис. 2б).

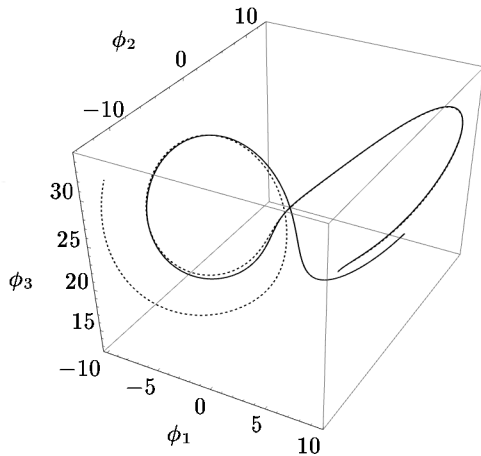


Рис. 2а. Траектории с одним $\vec{\phi}^0$ для источников \vec{r}^{*} и \vec{r}^0 ; $b = b_C$

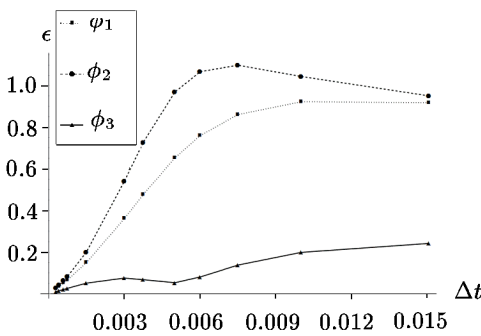


Рис. 2б. Относительные ошибки решений прямой задачи; $b = b_C$

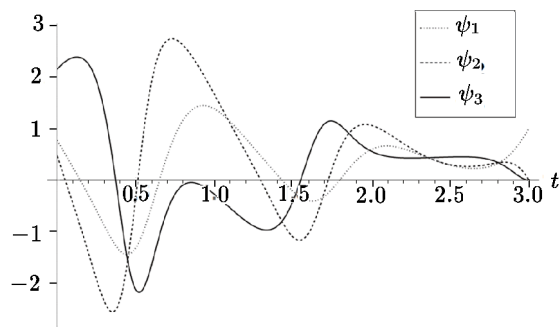


Рис. 2в. Решение сопряженной задачи для $H = e_1$; $b = b_C$

Сравнивая решения сопряженных задач на рис. 1в и рис. 2в отметим, что для $b = b_S$ на финальное наблюдение основное влияние оказывают значения источника, которые ближе к точке измерений, а в случае $b = b_C$ большее влияние оказывают источники, действующие на более ранних временах, что согласуется с определением хаотического поведения как сильной зависимости решения от изменения начальных данных и параметров.

На рис. 3а и 3б представлена относительная норма разницы между решениями сопряженной задачи для $H = e_1$ по согласованной и несогласованной схемам, а также между значениями градиента $\nabla J(\vec{r}_0)$ из (15) и $\nabla \bar{J}(\vec{r}_0)$ из (32) в зависимости от числа точек сетки по времени. При $b = b_S$ ошибка убывает линейно (рис. 3а), а при $b = b_C$ ошибка изменяется нелинейно, однако при достаточно малых Δt она также убывает (рис. 3б).

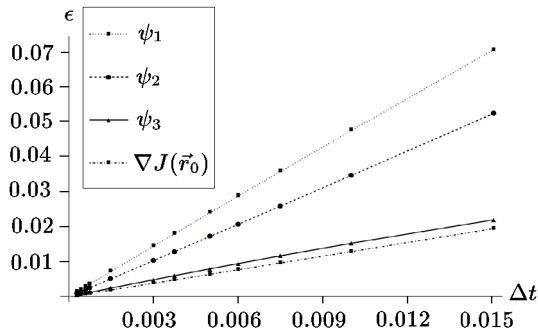


Рис. 3а. Относительная ошибка вычисления сопряженных задач для $H = e_1$ несогласованной схемы относительно согласованной; $b = b_S$

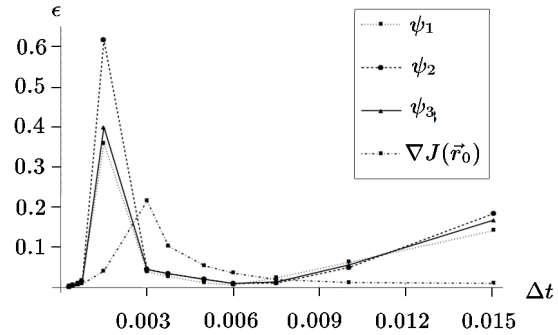


Рис. 3б. Относительная ошибка вычисления сопряженных задач для $H = e_1$ несогласованной схемы относительно согласованной; $b = b_C$

5.3. Сравнение алгоритмов при решении обратной задачи

Рассмотрим несколько численных экспериментов по решению обратной задачи при $N_t = 2500$ (на таком числе точек решение прямой задачи при $b = b_C$ качественно сходно с решением при больших N_t на выбранном временном интервале, т. е. оно достаточно для аппроксимации решения дифференциальной задачи). В таблицах 1а, 1б для обратной задачи идентификации источников по данным финального переопределения исследуем зависимость от начального приближения r_0 времени решения обратной задачи в секундах (t_X), десятичного логарифма относительных ошибок (ϵ_X) и десятичного логарифма норм невязок (z_X), вычисляемых для решения \vec{r}_X :

$$\epsilon_X = \log_{10} \frac{\|\vec{r}_X - \vec{r}^*\|_{\mathbb{R}^{N_c}}}{\|\vec{r}^*\|_{\mathbb{R}^{N_c}}}, \quad z_X = \log \frac{\|\bar{A}(\vec{\phi}^0, \vec{r}_X) - \vec{I}\|_{\mathbb{R}^\Xi}}{\|\vec{I}\|_{\mathbb{R}^\Xi}}. \quad (34)$$

Здесь нижний индекс X соответствует использованному методу: градиентный метод на основе согласованных схем С, градиентный метод на основе несогласованных схем I и метод Ньютона N.

Таблица 1а. Параметры сходимости для градиентного алгоритма на согласованных, несогласованных схемах и метода Ньютона для $N_t = 2500$ для различных значений; $b = b_S$

r_0	t_C, c	ϵ_C	z_C	t_I, c	ϵ_I	z_I	t_N, c	ϵ_N	z_N
{1,1,2}	41.26	-7.09	-15.42	20.59	-6.86	-14.96	2.6	-14.86	-29.79
{1,1,0}	41.1	-8.0	-17.05	26.77	-7.03	-15.28	2.62	-14.5	-29.52
{1,2,1}	18.74	-7.15	-15.55	21.2	-7.3	-15.86	2.58	-14.54	-29.6
{1,0,1}	25.19	-6.83	-14.91	32.22	-7.51	-16.24	2.64	-14.42	-28.95
{2,1,1}	37.59	-7.89	-17.01	33.93	-8.43	-16.71	2.15	-14.6	-29.2
{0,1,1}	28.27	-7.18	-15.56	37.23	-7.28	-15.82	2.18	-14.53	-28.7
{2,2,2}	45.06	-7.55	-16.1	37.08	-7.67	-16.36	2.62	-14.45	-28.26
{0,0,0}	27.84	-7.09	-15.38	33.82	-7.38	-15.88	2.7	-14.2	-27.83

При достаточно большом числе точек по времени согласованные и несогласованные схемы дают сходный результат. Можно отметить, что при $b = b_S$ метод Ньютона превосходит градиентный алгоритм по точности и времени выполнения (табл. 1а). При $b = b_C$ можно отметить, что в тех случаях, когда метод Ньютона сошелся к точному решению,

он превзошел градиентный алгоритм по точности и времени выполнения, однако он продемонстрировал больше случаев сходимости к другой неподвижной точке итерационного процесса (33) (табл. 16).

Таблица 16. Параметры сходимости для градиентного алгоритма на согласованных, несогласованных схемах и метода Ньютона для $N_t = 2500$ для различных значений; $b = b_C$

r_0	t_C, c	ϵ_C	z_C	t_I, c	ϵ_I	z_I	t_N, c	ϵ_N	z_N
{1,1,2}	398.33	-6.37	-14.41	704.87	-5.54	-12.75	3.76	-13.45	-24.78
{1,1,0}	800.65	-6.29	-14.18	547.14	-6.49	-14.65	3.66	-13.59	-25.33
{1,2,1}	654.31	-6.75	-14.42	539.4	-2.37	-6.37	8.03	-12.67	-25.26
{1,0,1}	698.97	-4.69	-10.86	595.77	-7.06	-15.75	24.03	-13.73	-23.53
{2,1,1}	488.35	-6.68	-15.01	418.14	-6.58	-14.83	7.38	-13.48	-24.71
{0,1,1}	341.44	-6.66	-14.97	541.09	-2.94	-7.55	8.23	0.63	-23.23
{2,2,2}	225.06	-6.36	-14.38	577.29	-6.55	-14.76	7.95	0.63	-24.52
{0,0,0}	49.81	1.62	-2.94	402.0	1.01	-1.79	8.72	0.63	-23.47

6. Заключение

В работе рассмотрена обратная задача идентификации источников — некоторых функций от времени — по конечному множеству данных наблюдений. Решение такой задачи предполагает необходимость задания дополнительных условий на искомые функции, например постулирование их определенного параметрического вида. Один из примеров такого задания представлен в статье: источники предполагаются постоянными на всем временном интервале. Заметим, что в каждой конкретной постановке требуется исследование корректности полученной обратной задачи для того, чтобы подобрать соответствующие процедуры регуляризации. Это можно сделать на основе оператора чувствительности, который позволяет связать вариацию наблюдаемых переменных с вариацией параметров модели.

В работе построены согласованные в смысле тождества Лагранжа схемы для решения прямых и сопряженных задач, а также оператор чувствительности для системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции–деструкции и ее дискретного аналога. Оператор чувствительности позволяет применять методы Ньютона для решения обратных задач.

В проведенных численных экспериментах с моделью Лоренца в двух различных режимах (со странным аттрактором и без него) эффективность градиентного алгоритма на основе согласованных и несогласованных схем была сходной. Метод Ньютона на основе оператора чувствительности оказался более эффективным, чем градиентные алгоритмы в случае режима без странного аттрактора. В случае режима со странным аттрактором итерационный метод типа Ньютона чаще чем метод градиентного типа сходил к неподвижным точкам, отличным от точного решения, однако в случае нахождения точного решения делал это эффективнее градиентного алгоритма по времени и по точности.

Благодарности. Автор благодарен В.В. Пененко и Е.А. Цветовой за ценные обсуждения, а также рецензентам за тщательное прочтение рукописи и конструктивные замечания.

Литература

1. **Васильев Ф.П.** Методы решения экстремальных задач. — М.: Наука, 1981.
2. **Алифанов О.М., Артюхин Е.А., Румянцев С.В.** Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложения к обратным задачам теплообмена. — М.: Наука, 1988. — Перевод: Alifanov O.M., Artiukhin E.A., Rumiantsev S.V. *Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems With Applications to Inverse Heat Transfer Problems*. — New York: Begell House, 1995.
3. **Лионс Ж.Л.** Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. — М.: Мир, 1972. — Перевод: Lions J. *Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations*. — Berlin: Springer-Verlag, 1971.
4. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H., Hirtl M., Žabkar R., Carmichael G.R., Flemming J., Inness A., Pagowski M., Camaño J.L.P., Saide P.E., Jose R.S., Sofiev M., Vira J., Baklanov A., Carnevale C., Grell G., and Seigneur C.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*. — 2015. — Vol. 15. — P. 5325–5358. — <https://doi.org/10.5194/acp-15-5325-2015>.
5. **Пененко В.В.** Методы численного моделирования атмосферных процессов. — Л.: Гидрометеоиздат, 1981.
6. **Ahrens B.** Variational data assimilation for a Lorenz model using a non-standard genetic algorithm // *Meteorology and Atmospheric Physics*. — 1999. — Vol. 70, № 3. — P. 227–238.
7. **Shutyaev V.P.** The properties of control operators in one problem on data control and algorithms for its solution // *Mathematical Notes*. — 1995. — Vol. 57. — P. 668–671.
8. **Марчук Г.И.** О постановке некоторых обратных задач // *Докл. АН СССР / Изд-во Наука*. — 1964. — Т. 156, № 3. — С. 503–506.
9. **Марчук Г.И.** Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. — М.: Наука, 1992. — Перевод: Marchuk G.I. *Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems*. — Dordrecht: Springer Netherlands, 1995. — DOI: 10.1007/978-94-017-0621-6.
10. **Pudykiewicz J.A.** Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters // *Atmospheric Environment*. — 1998. — Vol. 32. — P. 3039–3050.
11. **Ustinov E.A.** Adjoint sensitivity analysis of atmospheric dynamics: Application to the case of multiple observables // *J. of the Atmospheric Sciences*. — 2001. — Vol. 58. — P. 3340–3348.
12. **Пененко А.В.** О решении обратной коэффициентной задачи теплопроводности методом проекции градиента // *Сибирские электронные математические известия*. — 2010. — Т. 7. — С. 178–198. — (Тр. Первой международной молодежной школы-конференции “Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач”. Часть I).
13. **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 биоинформатика*. — 2016. — Т. 11, вып. 2. — С. 426–444.
14. **Канторович Л.В., Акилов Г.П.** Функциональный анализ. — М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1984.
15. **Daescu D., Carmichael G.R., and Sandu A.** Adjoint implementation of rosenbrock methods applied to variational data assimilation problems // *J. of Computational Physics*. — 2000. — Vol. 165. — P. 496–510.
16. **Карчевский А.Л.** Корректная схема действий при численном решении обратной задачи оптимизационным методом // *Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние*. — Новосибирск, 2008. — Т. 11, № 2. — С. 139–150. — Перевод: Karchevsky A.L. A proper flow chart for a numerical solution of an inverse problem by an optimization method // *Numerical Analysis and Applications*. — 2008. — Vol. 1, № 2. — P. 114–122. — DOI: 10.1134/s1995423908020031.

17. **Lorenz V.** Deterministic nonperiodic flow // J. of the Atmospheric Sciences. — 1963. — Vol. 20. — P. 130–141.
18. **Evensen G., Fario N.** Solving for the generalized inverse of the Lorenz model // J. of the Meteorological Society of Japan. — 1997. — Vol. 75, № 1B. — P. 229–243,
19. **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.
20. **Penenko V., Tsvetova E., and Penenko A.** Variational approach and Euler’s integrating factors for environmental studies // Computers & Mathematics with Applications — 2014. — Vol. 67. — P. 2240–2256.
21. **Hesstvedt E., Hov O., and Isaksen I.S.** Quasi-steady-state approximations in air pollution modeling: Comparison of two numerical schemes for oxidant prediction // Int. J. of Chemical Kinetics. — 1978. — Vol. 10. — P. 971–994.
22. **Jay L.O., Sandu A., Potra F.A., and Carmichael G.R.** Improved QSSA methods for atmospheric chemistry integration // SIAM J. on Scientific Computing. — 1997. — Vol. 18, № 1. — P. 182–202.
23. **Elbern H., Schmidt H., and Ebel A.** Variational data assimilation for tropospheric chemistry modeling // J. of Geophysical Research: Atmospheres. — 1997. — Vol. 102. — P. 15967–15985.
24. Wolfram language & system documentation center: Nonlinear conjugate gradient methods. — <http://reference.wolfram.com/language/tutorial/UnconstrainedOptimizationConjugateGradientMethods.html>.
25. Wolfram language & system documentation center: Newton’s method. — <http://reference.wolfram.com/language/tutorial/UnconstrainedOptimizationNewtonsMethodRoot.html>.

*Поступила в редакцию 27 марта 2017 г.,
в окончательном варианте 14 июня 2017 г.*

Литература в транслитерации

1. **Vasil’ev F.P.** Metody resheniya ekstremal’nyh zadach. — M.: Nauka, 1981.
2. **Alifanov O.M., Artyuhin E.A., Rumyantsev S.V.** Ekstremal’nye metody resheniya nekorrektnykh zadach i ih prilozheniya k obratnym zadacham teploobmena. — M.: Nauka, 1988. — Perevod: Alifanov O.M., Artiukhin E.A., Rumyantsev S.V. Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems With Applications to Inverse Heat Transfer Problems. — New York: Begell House, 1995.
3. **Lions Zh.L.** Optimal’noe upravlenie sistemami, opisyyvaemyimi uravneniyami s chastnymi proizvodnymi. — M.: Mir, 1972. — Perevod: Lions J. Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations. — Berlin: Springer-Verlag, 1971.
4. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H., Hirtl M., Žabkar R., Carmichael G.R., Flemming J., Inness A., Pagowski M., Camaño J.L.P., Saide P.E., Jose R.S., Sofiev M., Vira J., Baklanov A., Carnevale C., Grell G., and Seigneur C.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmospheric Chemistry and Physics Discussions. — 2015. — Vol. 15. — P. 5325–5358. — <https://doi.org/10.5194/acp-15-5325-2015>.
5. **Penenko V.V.** Metody chislennogo modelirovaniya atmosferynyh protsessov. — L.: Gidrometeoizdat, 1981.
6. **Ahrens B.** Variational data assimilation for a Lorenz model using a non-standard genetic algorithm // Meteorology and Atmospheric Physics. — 1999. — Vol. 70, № 3. — P. 227–238.
7. **Shutyaev V.P.** The properties of control operators in one problem on data control and algorithms for its solution // Mathematical Notes. — 1995. — Vol. 57. — P. 668–671.

8. **Marchuk G.I.** O postanovke nekotorykh obratnykh zadach // Dokl. AN SSSR / Izd-vo Nauka. — 1964. — Т. 156, № 3. — С. 503–506.
9. **Marchuk G.I.** Sopryazhennyye uravneniya i analiz slozhnykh sistem. — М.: Nauka, 1992. — Perevod: Marchuk G.I. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. — Dordrech: Springer Netherlands, 1995. — DOI: 10.1007/978-94-017-0621-6.
10. **Pudykiewicz J.A.** Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters // Atmospheric Environment. — 1998. — Vol. 32. — P. 3039–3050.
11. **Ustinov E.A.** Adjoint sensitivity analysis of atmospheric dynamics: Application to the case of multiple observables // J. of the Atmospheric Sciences. — 2001. — Vol. 58. — P. 3340–3348.
12. **Penenko A.V.** O reshenii obratnoy koeffitsientnoy zadachi teploprovodnosti metodom proektsii gradienta // Sibirskie elektronnyye matematicheskie izvestiya. — 2010. — Т. 7. — С. 178–198. — (Tr. Pervoy mezhdunarodnoy molodezhnoy shkoly-konferentsii “Teoriya i chislennyye metody resheniya obratnykh i nekorrektnykh zadach”. Chast’ I).
13. **Penenko A.V., Nikolaev S.V., Golushko S.K., Romashchenko A.V., Kirilova I.A.** Chislennyye algoritmy identifikatsii koeffitsienta diffuzii v zadachah tkanevoy inzhenerii // Mat. biol. i bioinformatika. — 2016. — Т. 11, vyp. 2. — С. 426–444.
14. **Kantorovich L.V., Akilov G.P.** Funktsional’nyy analiz. — М.: Nauka. Glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury, 1984.
15. **Daescu D., Carmichael G.R., and Sandu A.** Adjoint implementation of rosenbrock methods applied to variational data assimilation problems // J. of Computational Physics. — 2000. — Vol. 165. — P. 496–510.
16. **Karchevskiy A.L.** Korrektnaya skhema deystviy pri chislennoy reshenii obratnoy zadachi optimizatsionnym metodom // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2008. — Т. 11, № 2. — С. 139–150. — Perevod: Karchevskiy A.L. A proper flow chart for a numerical solution of an inverse problem by an optimization method // Numerical Analysis and Applications. — 2008. — Vol. 1, № 2. — P. 114–122. — DOI: 10.1134/s1995423908020031.
17. **Lorenz V.** Deterministic nonperiodic flow // J. of the Atmospheric Sciences. — 1963. — Vol. 20. — P. 130–141.
18. **Evensen G., Fario N.** Solving for the generalized inverse of the Lorenz model // J. of the Meteorological Society of Japan. — 1997. — Vol. 75, № 1B. — P. 229–243.
19. **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.
20. **Penenko V., Tsvetova E., and Penenko A.** Variational approach and Euler’s integrating factors for environmental studies // Computers & Mathematics with Applications — 2014. — Vol. 67. — P. 2240–2256.
21. **Hesstvedt E., Hov O., and Isaksen I.S.** Quasi-steady-state approximations in air pollution modeling: Comparison of two numerical schemes for oxidant prediction // Int. J. of Chemical Kinetics. — 1978. — Vol. 10. — P. 971–994.
22. **Jay L.O., Sandu A., Potra F.A., and Carmichael G.R.** Improved QSSA methods for atmospheric chemistry integration // SIAM J. on Scientific Computing. — 1997. — Vol. 18, № 1. — P. 182–202.
23. **Elbern H., Schmidt H., and Ebel A.** Variational data assimilation for tropospheric chemistry modeling // J. of Geophysical Research: Atmospheres. — 1997. — Vol. 102. — P. 15967–15985.
24. Wolfram language & system documentation center: Nonlinear conjugate gradient methods. — <http://reference.wolfram.com/language/tutorial/UnconstrainedOptimizationConjugateGradientMethods.html>.
25. Wolfram language & system documentation center: Newton’s method. — <http://reference.wolfram.com/language/tutorial/UnconstrainedOptimizationNewtonsMethodRoot.html>.