УДК 517.972.7:519.6

Последовательные алгоритмы усвоения данных в моделях мониторинга качества атмосферы на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями*

А.В. Пененко, В.В. Пененко, Е.А. Цветова

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

E-mails: a.penenko@yandex.com (Пененко А.В.), penenko@sscc.ru (Пененко В.В.), e.tsvetova@ommgp.sscc.ru (Цветова Е.А.)

Пененко А.В., Пененко В.В., Цветова Е.А. Последовательные алгоритмы усвоения данных в моделях мониторинга качества атмосферы на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2016. — Т. 19, № 4. — С. 401–418.

Задача усвоения данных для нестационарных моделей рассматривается как последовательность связанных обратных задач о восстановлении пространственно-временной структуры функций состояния с учетом различных наборов данных измерений. Усвоение данных осуществляется вместе с идентификацией дополнительной искомой функции, которую мы трактуем как функцию неопределенности модели. Основой для построения алгоритмов служит вариационный принцип. Приводятся и анализируются различные версии алгоритмов решения задачи. На основе принципа невязки построен вычислительно эффективный алгоритм для решения задачи усвоения данных в локально-одномерном случае и получена теоретическая оценка его эффективности. Этот алгоритм является составляющей системы усвоения данных в контексте общей схемы расщепления нестационарной трехмерной модели транспорта и трансформации атмосферной химии.

DOI: 10.15372/SJNM20160405

Ключевые слова: *усвоение данных, вариационный принцип, слабые ограничения, прямые и обратные задачи, модель как регуляризатор, последовательные алгоритмы.*

Penenko A.V., Penenko V.V., Tsvetova E.A. Sequential data assimilation algorithms in air quality monitoring models based on weak-constraint variational principle // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2016. — Vol. 19, № 4. — P. 401–418.

Data assimilation problem for non-stationary model is considered as a sequence of the linked inverse problems which reconstruct, taking into account the different sets of measurement data, the space-time structure of the state functions. Data assimilation is carried out together with the identification of additional unknown function, which we interpret as a function of model uncertainty. The variational principle serves as a basis for constructing algorithms. Different versions of the algorithms are presented and analyzed. Based on the discrepancy principle, a computationally efficient algorithm for data assimilation in a locally one-dimensional case is constructed. The theoretical estimation of its performance is obtained. This algorithm is one of the core components of the data assimilation system in the frames of splitting scheme for the non-stationary three-dimensional transport and transformation models of atmospheric chemistry.

Keywords: *data assimilation, variational principle, weak-constraint, direct and inverse problems, model as regularizer, sequential algorithms.*

*Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33П и РФФИ (проекты № 14-01-00125-а и № МК-8214.2016.1).

1. Введение

Математическое моделирование получило широкое распространение при исследовании различных процессов и явлений, поскольку модели, конструируемые на основе имеющихся теоретических представлений, позволяют количественно проверять гипотезы о причинах и следствиях описываемых ими феноменов. По мере развития математического моделирования исследователи начали принимать во внимание не только предполагаемую структуру изучаемой системы, но и ту информацию о системе, которая реально доступна. В связи с этим появилась возможность постановок обратных задач, что значительно расширило спектр изучаемых проблем.

Статья посвящена применению последовательных вариационных алгоритмов со слабыми ограничениями для решения задач усвоения данных, определяемых как последовательность связанных обратных задач. Следует заметить, что прямые задачи, суть которых состоит в моделировании поведения системы на основе ее математической модели с заданными параметрами и источниками, являются неотъемлемой частью постановок обратных задач. Мы различаем следующие основные типы задач обратного моделирования, о которых пойдет речь в данной статье:

- **Задачи управления:** Подобрать параметры моделей так, чтобы модель в определенном смысле воспроизводила данные измерений. Это может потребовать решения последовательности прямых (и сопряженных) задач с различными параметрами моделей.
- **Обратные задачи:** По частичной информации о функции состояния модели требуется найти неизвестные функцию состояния модели и ее параметры. Это может потребовать решения последовательности задач управления.
- **Задачи усвоения данных:** По частичной информации о функции состояния модели, поступающей в систему моделирования в процессе решения задачи, требуется восстанавливать неизвестную функцию состояния и параметры модели на основе различного количества доступных данных. Это может потребовать решения последовательности связанных обратных задач с различными наборами данных измерений.

Обратные задачи успешно применяются при исследовании систем, структура которых остается неизменной, как это происходит, например, с геологическими объектами на малых временных масштабах или при рассмотрении ретроспективных задач. Алгоритмы усвоения данных развивались для более динамичных систем, и самым известным приложением для таких алгоритмов являются задачи прогноза погоды, включающие задачи усвоения данных для моделей гидротермодинамики океанов и морей.

Основой для численных алгоритмов, о которых пойдет речь дальше, послужили работы Г.И. Марчука, который сформулировал подход к обратным задачам на основе сопряженных уравнений [7] и впервые применил теорию возмущений с использованием сопряженных уравнений, определяемых тождеством Лагранжа, к задачам динамики атмосферы, океана и теории климата [8] . В продолжение этих работ вариационный принцип Эйлера-Лагранжа был сформулирован в [12, 13, 14, 30, 31].

Вариационные методы усвоения данных с применением сопряженных уравнений для исследования атмосферных процессов начались с работ [14, 29, 35]. Историю развития и современное состояние проблемы, расстановку мировых приоритетов можно найти в недавних обзорах, содержащих более 1000 наименований монографий и статей [22, 32, 28, 23].

В последнее время в литературе все чаще встречается термин “химическая погода” (см., например, [27]), и все больше метеорологических центров обращаются к различным вариантам систем прогноза химического состава атмосферы. Решение совместных задач динамики и химии атмосферы предъявляет дополнительные требования к алгоритмам усвоения данных [24, 36, 23]. Перечислим лишь некоторые особенности этого класса задач.

- Химический состав атмосферы может быстро меняться, поэтому интерес представляют текущие и будущие состояния системы (диагноз текущего состояния и прогноз химической погоды) в “реальном времени”.
- Разнообразие химических механизмов и их нелинейный характер; различные временные масштабы процессов порождают “жесткость” систем уравнений химической кинетики.
- Существенное влияние на поведение системы оказывают не только начальные данные, но и коэффициенты моделей и источники примесей.
- Высокая размерность ($\approx 10^7$) современных моделей атмосферной химии, которая определяется пространственным разрешением их дискретных аналогов и количеством рассматриваемых веществ, вынуждает заботиться о вычислительной эффективности алгоритмов.
- Данных измерений существенно меньше, чем искомых переменных. Кроме того, ошибка измерений концентраций может быть достаточно велика (в нашем опыте работы с реальными данными — до 20%).

При реализации систем усвоения данных желательно использовать уже имеющиеся компоненты технологии моделирования, поскольку трудоемкость реализации прогностических моделей составляет годы работы коллективов исполнителей.

Хотя в настоящей работе мы обсуждаем лишь часть разрабатываемого алгоритма усвоения данных, соответствующую линейным процессам транспорта субстанций, требования к этому компоненту задаются контекстом применения всей системы усвоения химических данных. Общая структура развиваемой нами технологии моделирования представлена в [16–18, 33]. Для построения численных схем мы применяем методы декомпозиции и расщепления [2, 9, 19], обеспечивающие им свойства суммарной аппроксимации и допускающие параллельную организацию вычислений.

Целями настоящей работы являются теоретические исследования, связанные с оценками эффективности процедуры последовательного усвоения данных на основе вариационного принципа со слабыми ограничениями, выявление факторов, влияющих на эффективность, а также обоснование применения безытерационного алгоритма решения задачи вариационного усвоения данных совместно с принципом невязки для решения задачи усвоения данных. Для наглядности представления основной идеи этого алгоритма, рассмотрим его на примере одномерной задачи переноса и турбулентного обмена некой субстанции. По сути, версия этого алгоритма в квази-одномерном случае, рассматриваемая здесь, является базовым вычислительным ядром системы усвоения данных в контексте общей схемы расщепления нестационарной трехмерной модели транспорта и трансформации атмосферной химии.

В пункте 2 дана постановка задачи; в п. 3 обсуждаются алгоритмы численного решения задачи усвоения данных, в частности, прямой алгоритм усвоения, важный в задачах транспорта многокомпонентных примесей; в п. 4 показано, как результат усвоения данных связан с “точным решением”.

2. Постановка задачи последовательного вариационного усвоения данных

Рассмотрим операторное уравнение с линейным оператором $H : X \to Y$, связывающим известный результат измерений $I \in Y$ с функцией состояния $\varphi \in X$, которая интерпретируется как поле концентраций некоторого вещества в пространственной сеточной области ω_x в момент проведения измерений:

$$H\varphi = I + \delta I. \tag{1}$$

Элемент $\delta I \in Y$ — имеет смысл погрешности измерений. Он неизвестен, однако известна оценка его нормы $\delta = \|\delta I\|_Y \geq 0$. Предположим, что пространства X, Y функций состояния и результатов измерений соответственно — конечномерные Гильбертовы. Это допустимо, так как в существующих системах моделирования атмосферных процессов обычно используются численные схемы на конечном числе вложенных сеток без перехода к пределу по числу точек сетки дискретных моделей. При этом размерность пространства Y меньше размерности X (т. е. измеряется меньше величин, чем требуется найти), и задача решения (1) некорректна. Оператор H нельзя обратить устойчиво, однако есть возможность вычислить действие этого оператора и его сопряженного $H^* : Y \to X$ на некоторые элементы $\varphi \in X$ и $I \in Y$ соответственно. Пусть кроме того $\mathrm{Ker} H^* = \{0\}$. Примером H является оператор, который ставит в соответствие φ набор его значений в конечном числе точек области ω_x.

Можно решать поставленную задачу, минимизируя функционал Тихонова [20]:

$$J(\varphi) = \|H\varphi - I\|_Y^2 + \alpha \|\varphi - \varphi_0\|_{\bar{X}}^2 , \tag{2}$$

для некоторого $\varphi_0 \in X$ и $\alpha > 0$. Заметим, что теория Тихонова изучает способы выбора параметра регуляризации α, но не отвечает на вопрос о выборе универсального стабилизатора (определяющего соответствующий регуляризатор), например в форме $\|\varphi - \varphi_0\|_{\bar{X}}$, т. е. подходящей нормы $\|.\|_{\bar{X}}$ и элемента φ_0. Этот факт обусловил широкий спектр исследований различных регуляризаторов.

Стабилизатор можно выбирать по смыслу физической постановки задачи. Предположим, что $\varphi = \varphi^j \in X$ — это поле концентраций некоторого химического вещества в атмосфере на j-м шаге равномерной сетки по времени $\omega_t = \left\{t^j; t^j = t^{j-1} + \tau; j = \overline{1, \Theta}\right\} \subset [0, \bar{T}]$, где Θ и $\bar{T}$ могут быть сколь угодно большими. Равномерность сетки здесь роли не играет, все результаты переносимы и на более общий случай. Оператор $H = H^j : X \to Y^j$ вместе с Y^j и $I^j \in Y^j$ также зависят от номера шага по времени. В этом случае естественно выбрать стабилизатор на основе модели конвекции-диффузии примеси. Таким образом, модель становится естественным регуляризатором для некорректной задачи обращения оператора измерений [13]. Предположим, что φ^j является решением дискретной нестационарной задачи в момент времени $t^j \in \omega_t$, записанной в неявной форме:

$$L^j \varphi^j = \varphi^{j-1} + \tau f^j + \tau r^j, \tag{3}$$

где $L^j : X \to X$ — невырожденный линейный оператор модели, зависящий от шага по времени j; $f^j \in X$ — априори известные источники; $r^j \in X$ — искомая функция, которую мы трактуем как функцию неопределенностей модели процессов. Эту функцию также иногда называют “управлением” или “дополнительной неизвестной”. В общем случае мы подразумеваем в ней суммарную величину всех неопределенностей, в том числе недостатки наших знаний о физических процессах, источников воздействий, погрешности аппроксимаций и алгоритмов и т. д. Формально, в структуре уравнения (3) она выглядит как дополнительный источник. Однако ее роль в нашем подходе состоит еще и в том, чтобы сделать эквивалентными формулировки вариационного принципа взвешенных наименьших квадратов Гаусса, вариационного принципа Эйлера-Лагранжа и метода фильтрации Калмана (которые различаются способами реализации), а также одновременно оценить точность модели. Постановки такого типа в литературе по усвоению данных называются постановками с неточной моделью или со слабыми ограничениями.

Введем обозначение

$$F^j = \varphi^{j-1} + \tau f^j$$

и перепишем (3) в виде

$$L^j \varphi^j = F^j + \tau r^j. \tag{4}$$

Предположим, что для уравнения (3) есть возможность устойчиво обратить оператор L^j и сопряженный с ним L^{j*} .

Итак, определим некоторую траекторию $\left\{\bar\varphi^j \in X; j = \overline{1,\Theta}\right\}$ в фазовом пространстве, определяемую системой:

$$\bar\varphi^0 = \bar\varphi_0, \tag{5}$$

$$L^j\ \bar\varphi^j = \bar\varphi^{j-1} + \tau f^j + \tau \bar r^j, \quad j = 1, \ldots, \Theta, \tag{6}$$

которую будем называть точным решением задачи усвоения данных. Связь точного решения с данными измерений определяется как

$$H^j \bar\varphi^j = I^j + \delta I^j, \quad \delta^j = \left\|\delta I^j\right\|_Y, \quad j = 1, \ldots, \Theta. \tag{7}$$

Сформулируем глобальную обратную задачу: зная $\left\{L^m, H^m, f^m, I^m, \delta^m; m = \overline{1,\Theta}\right\}$, требуется определить $\left\{\bar\varphi^m; m = \overline{1,\Theta}\right\}$, где m номер шага по времени $t^m \in \omega_t$. То есть нужно определить траекторию по всем имеющимся данным измерений. Однако на практике в каждый момент времени известно только конечное число измерений, сделанных к данному моменту, поэтому определим последовательность, состоящую из Θ локальных обратных задач: требуется, зная $\left\{L^m, f^m; m = \overline{1,\Theta}\right\}$ и $\left\{H^m, I^m, \delta^m; m = \overline{1,j}\right\}$, определить $\left\{\bar\varphi^m; m = \overline{1,\Theta}\right\}$. Решение каждой локальной обратной задачи неединственно. Назовем последовательность таких локальных обратных задач задачей усвоения данных (аналогично [13, 16, 25]). В каждой следующей обратной задаче данных больше, чем в предыдущих, и ее решение можно использовать при решении последующих.

Теперь рекурсивно определим последовательность задач, которые будем решать в рамках работы алгоритма последовательного вариационного усвоения данных со слабыми ограничениями. В алгоритмах последовательного усвоения данных, например, 3DVAR и фильтрах Калмана [26], предполагается, что на шаге j данные измерений с предыдущих шагов учтены в состоянии φ^{j-1}, поэтому для уточнения текущего состояния за счет выбора r^j используется только $H^j\varphi^j = I^j + \delta I^j$.

Пусть на шаге $j-1$ имеется решение $\left\{\varphi^m_{j-1}; m = \overline{1,\Theta}\right\}$. Здесь нижний индекс указывает на количество имеющихся при построении траектории данных измерений (к моменту $j-1$), а верхний — номер шага на временной сетке модели. Определим решение на следующем шаге:

$$\varphi_j^m = \varphi_{j-1}^m, \quad 1 \le m \le j-1, \tag{8}$$

$$\{\varphi_j^j, r^j\} = \underset{\{\varphi,r\}\in Q^j}{\arg\min} J^j(\varphi, r), \tag{9}$$

$$J^j(\varphi, r) = \left\|H^j\varphi - I^j\right\|^2 + \alpha \left\|r\right\|^2, \quad Q^j = \{\{\varphi, r\}|, L^j\varphi = F^j + \tau r\}, \tag{10}$$

$$L^m\varphi_j^m = \varphi_j^{m-1} + \tau f^m, \quad m > j. \tag{11}$$

Здесь параметр регуляризации α выбирается по принципу невязки (подробнее об этом будет сказано в п. 3).

Оптимизационные задачи и задачи управления являются важнейшим инструментом решения обратных задач. При этом целью задач управления является поиск φ^j, r^j, минимизирующих целевой функционал $J^j(\varphi, r)$, тогда как в обратных задачах требуется найти $\bar{\varphi}^j$. Методы решения задач управления на основе функционалов (9), (10) относятся к методам типа взвешенных наименьших квадратов Гаусса [3]. Аналогичные постановки задач оптимального управления с использованием сопряженных уравнений в задачах математической физики изучались в [1]. Ранее вне контекста последовательного усвоения данных они рассматривались, например, в [6].

Одной из целей данной работы является сравнение решения $\left\{\varphi_j^m \in X; m = \overline{1,\Theta}\right\}$, полученного приведенным далее алгоритмом последовательного усвоения данных, с "точным" решением $\left\{\bar{\varphi}^m \in X; m = \overline{1,\Theta}\right\}$. Для этого мы займемся интерпретацией результатов, полученных в работах А.Н. Тихонова [20], в терминах последовательного усвоения данных.

3. Решение задачи последовательного вариационного усвоения данных

Рассмотрим способы решения (9), (10), для краткости опуская нижний индекс у φ_j^j. Если исключить функцию неопределенности r из постановки задачи управления (9), (10), то получим классическую постановку метода взвешенных наименьших квадратов Гаусса:

$$\hat{J}^j(\varphi) = \left\|H\varphi - I^j\right\|^2 + \frac{\alpha}{\tau^2}\left\|L\varphi - F^j\right\|^2, \tag{12}$$

$$\varphi^j = \underset{\varphi}{\arg\min} \hat{J}^j(\varphi). \tag{13}$$

Здесь и далее верхний индекс j оставлен у переменных, связанных с φ^j и опущен у операторов H и L. Функционал (12) с невырожденным оператором L имеет единственный минимум.

Сравним (12) с функционалом Тихонова (2). Пусть φ_0 — решение уравнения

$$L\varphi_0^j = F^j, \tag{14}$$

тогда

$$\hat{J}^j(\varphi) = \left\|H\varphi - I^j\right\|^2 + \frac{\alpha}{\tau^2}\left\langle L\varphi - L\varphi_0^j, L\varphi - L\varphi_0^j\right\rangle = \left\|H\varphi - I^j\right\|^2 + \frac{\alpha}{\tau^2}\left\langle L^*L\left(\varphi - \varphi_0^j\right), \varphi - \varphi_0^j\right\rangle.$$

То есть оператор модели задает естественную норму в X. Обычно метод с обратной матрицей ковариаций ошибок модели вместо L^*L в стабилизаторе называют 3DVAR. В литературе по усвоению данных φ_0 называют фоновым прогнозом (background forecast). Связь между Тихоновской регуляризацией и алгоритмами 3DVAR и 4DVAR можно найти в монографии [25]. Уравнение Эйлера–Лагранжа для (12) имеет вид

$$\left(\tau^2 H^* H + \alpha L^* L\right)\varphi = \tau^2 H^* I^j + \alpha L^* F^j. \tag{15}$$

Представление (15) удобно для теоретических выкладок, однако при огранизации вычислений, во-первых, для обращения $(H^*H + \alpha L^* L)$ потребуется алгоритм, отличный от алгоритмов обращения операторов L и L^*, и, во-вторых, число обусловленности матрицы при возведении в квадрат увеличится, что увеличит ошибки при их обращении.

Замечание 1. Для устранения последнего недостатка С.К. Годунов предложил прием регуляризации плохо обусловленных систем [5] за счет объединения нескольких уравнений в одну систему. В рассматриваемом нами случае использование этой идеи приводит к объединению уравнений (1), (14) в систему вида:

$$\begin{pmatrix} H \\ \alpha L \end{pmatrix}\varphi = \begin{pmatrix} I^j \\ \alpha F^j \end{pmatrix}.$$

Матрица этой системы становится прямоугольной, и для ее обращения потребуется разработать специальный алгоритм для прямоугольных матриц большой размерности, поэтому в данной работе этот способ не применяется.

Вариационный принцип (см., например, [13]) состоит в том, что изучаемый целевой функционал (в данном случае $J^j(\varphi, r)$) объединяется с математической моделью, записанной в обобщенной постановке, в расширенный функционал на основе подхода, который в математическом анализе называется методом множителей Лагранжа. Для этого уравнение модели (4) скалярно умножается на вектор $\varphi^* \in X$, представляющий собой распределенный множитель Лагранжа, и добавляется к изучаемому функционалу:

$$\begin{aligned} \tilde{J}^j(\varphi, r, \varphi^*) &= \left\|H\varphi - I^j\right\|^2 + \alpha\left\|r\right\|^2 + \frac{1}{\tau}\left\langle L\varphi - F^j - \tau r, \varphi^*\right\rangle \\ &= \left\|H\varphi - I^j\right\|^2 + \alpha\left\|r\right\|^2 + \frac{1}{\tau}\left\langle \varphi, L^*\varphi^*\right\rangle + \frac{1}{\tau}\left\langle -F^j - \tau r, \varphi^*\right\rangle. \end{aligned} \tag{16}$$

В соответствии с вариационным принципом Эйлера–Лагранжа, решение задачи условной оптимизации удовлетворяет системе уравнений для поиска стационарной точки расширенного функционала (16):

$$\begin{aligned} \partial_{\varphi^*}\tilde{J}^j(\varphi, r, \varphi^*) &= L\varphi - F^j - \tau r = 0, \\ \partial_{\varphi}\tilde{J}^j(\varphi, r, \varphi^*) &= 2H^*(H\varphi - I^j) + \frac{1}{\tau}L^*\varphi^* = 0, \\ \partial_{r}\tilde{J}^j(\varphi, r, \varphi^*) &= 2\alpha r - \varphi^* = 0. \end{aligned} \tag{17}$$

В матричной форме эту систему можно записать в виде

$$\begin{bmatrix} L & 0 & -\tau \\ 2H^*H & \frac{1}{\tau}L^* & 0 \\ 0 & -1 & 2\alpha \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi^* \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F^j \\ 2H^*I^j \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Если исключить третье уравнение, то

$$\begin{bmatrix} L & -\dfrac{\tau}{2\alpha} \\ 2H^*H & \dfrac{1}{\tau}L^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \varphi^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F^j \\ 2H^*I^j \end{bmatrix}. \tag{19}$$

Если же исключить φ^* из (19) то можно убедиться, что φ удовлетворяет (15).

Таким образом, вариационный подход с использованием множителей Лагранжа в структуре функционала (16) является конструктивным способом декомпозиции системы (15) на прямые и сопряженные уравнения со сходными свойствами и схемой решения, а также получения соотношения на переменную r (18).

Параметр регуляризации α в реальных условиях при наличии ошибок измерений будем искать по теории регуляризации А.Н. Тихонова относительно принципа невязки [10]. Интерпретируем результаты из [20] в терминах алгоритма вариационного усвоения данных:

- Пусть на шаге j имеется φ^{j-1}.
- Вычислим фоновый прогноз $L\varphi_0^j = F^j$.
- Если на шаге j нет новых данных измерений или $\left\|H\varphi_0^j - I^j\right\|^2 \le (\delta^j)^2$, то $\varphi^j = \varphi_0^j$ (т. е. фоновый прогноз достаточно хорошо воспроизводит данные измерений). Иначе методом золотого сечения найдем такое $\alpha^*(\delta^j)$, что для $\varphi^j_{\alpha^*(\delta^j)}$ — решения системы (19) верно соотношение

  $$\left\|H\varphi^j_{\alpha^*(\delta^j)} - I^j\right\|^2 = (\delta^j)^2,$$

  и положим $\varphi^j = \varphi^j_{\alpha^*(\delta^j)}$.
- Переходим на шаг $j+1$.

Замечание 2. В [20] доказывается, что такой выбор параметра регуляризации в теоретически важном случае убывания ошибки в измерениях $\delta \to 0$, позволяет получить сходимость решений $r_{\alpha^*(\delta)}$ обратной задачи на шаге j:

$$\lim_{\delta\to 0} r_{\alpha^*(\delta)} = \check{r}$$

к нормальному решению $\check{r}$ уравнения

$$\tau HL^{-1}r = I^j - HL^{-1}F^j = HL^{-1}\left(\bar{\varphi}^{j-1} - \varphi^{j-1} + \tau\bar{r}^j\right). \tag{20}$$

В силу вырожденности оператора τHL^{-1} решение не будет единственным. Существование нормального решения, а также сходимость к нему при $\delta = 0$ и $\alpha \to 0+0$ в контексте решения глобальной задачи управления доказана в [1]. Однако еще раз заметим, что на практике, при безусловном наличии ошибок измерений $\delta > 0$, устремлять $\alpha \to 0+0$ не обязательно и, как мы покажем дальше, при высоких уровнях погрешности в данных это может быть менее эффективно, чем использовать решение без усвоения.

Для систем большой размерности и выбора параметра регуляризации по принципу невязки желательно использовать безытерационные (прямые) алгоритмы решения (19). Такие алгоритмы были построены при усвоении данных контактных измерений в локально-одномерных моделях транспорта примесей [16, 11, 17]. Их также можно использовать в системах “мелкозернистого усвоения”, когда данные измерений усваиваются в различных частях модели с последующим их согласованием. Пример таких систем представлен в [17, 11], где усвоение данных проводится на отдельных шагах схем расщепления.

Пусть ϕ_i^j — функция состояния модели на j-м шаге по времени в i-м узле пространственной сетки

$$\omega_x = \left\{x_i;\ x_1 = 0;\ x_{i+1} = x_i + h;\ x_N = D;\ i = \overline{1, N}\right\} \subset [0, D],$$

$\tilde{I}_i^j$ — продолжение результатов измерений нулем на всю сеточную область, $\tilde{\sigma}_i$ — продолжение дисперсии ошибок измерений единицей, $W_i^j = (H^*H)_{i,i}$ — характеристическая функция системы измерений, равная единице, если в точке $\left(t^j, x_i\right)$ задан результат измерения, и нулю, если измерений нет.

Лемма 1. *Минимум функционала*

$$J^j(\phi^j, r^j) = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\phi_i^j - \tilde{I}_i^j}{\tilde{\sigma}_i}\right)^2 W_i^j + \alpha\sum_{i=1}^{N}\left(r_i^j\right)^2\right)\tau \tag{21}$$

на ограничениях

$$-a_i\phi_{i+1}^j + b_i\phi_i^j - c_i\phi_{i-1}^j = \phi_i^{j-1} + \tau(f + r)_i^j, \quad i = \overline{1, N}, \quad c_0 = 0, \quad a_N = 0$$

определяется матричной системой уравнений:

$$-A_i\Phi_{i+1}^j + B_i\Phi_i^j - C_i\Phi_{i-1}^j = F_i^j, \quad i = \overline{1, N}, \tag{22}$$

где

$$A_i = \begin{cases} \begin{pmatrix} a_i & 0 \\ 0 & c_{i+1} \end{pmatrix}, & i = \overline{1, N-1}, \\ 0, & i = N, \end{cases} \qquad C_i = \begin{cases} 0, & i = 1, \\ \begin{pmatrix} c_i & 0 \\ 0 & a_{i-1} \end{pmatrix}, & i = \overline{2, N}, \end{cases}$$

$$B_i = \begin{pmatrix} b_i & -\tau \\ W_i^j\tau/(\alpha\bar{\sigma}_i{}^2) & b_i \end{pmatrix}, \quad \Phi_i^j = \begin{pmatrix} \phi_i^j \\ \phi_i^{*j} \end{pmatrix}, \quad F_i^j = \begin{pmatrix} \phi_i^{j-1} \\ W_i^j\tau\bar{I}_i^j/(\alpha\bar{\sigma}_i{}^2) \end{pmatrix}, \quad i = \overline{1, N}.$$

Система (22) *решается методом матричной прогонки.*

Алгоритм (21), (22) представляет собой один из основных элементов при решении прямых и сопряженных задач усвоения данных наблюдений на основе вариационных принципов в сочетании с методами декомпозиции функционалов [2] и методами расщепления операторов моделей процессов, обладающих свойствами суммарной аппроксимации [9, 19]. Конкретно, в рамках схем расщепления, локально-одномерные схемы для операторов моделей процессов вдоль координатных линий четырехмерной сеточной области строятся на основе вариационной концепции сопряженных интегрирующих множителей [33].

Примеры расчетов по описанным алгоритмам приведены в [17, 34]. В [34] обсуждаются результаты моделирования с использованием реальных данных. Там же дано описание необходимой подготовительной технической работы.

Если же в других постановках, приводящих к решению (9), (10), нельзя обойтись без итерационных методов, то алгоритм становится не столь эффективным с вычислительной точки зрения. Действительно, во-первых, потребуется делать вложенные итерации для минимизации целевого функционала при заданном α, и, во-вторых, итеративно находить α. Разумеется, есть вероятность, что найденный минимум для некоторого α будет хорошим начальным приближением для минимума функционала с некоторым близким α'. Поэтому в общем случае можно воспользоваться итерационным методом, как это делалось в [13] для решения задач вариационного усвоения данных.

Лемма 2. *Если*

$$r_0 = 0, \tag{23}$$

$$L\varphi_n = F^j + \tau r_n, \tag{24}$$

$$L^*\varphi_n^* = -2\tau H^*(H\varphi_n - I^j), \tag{25}$$

$$r_{n+1} = r_n - \gamma\partial_r \tilde{J}^j(\varphi, r, \varphi^*) = r_n - \gamma\left(2\alpha r_n - \varphi_n^*\right), \tag{26}$$

где n — номер итерации и

$$0 < \gamma < \frac{1}{\alpha + \left\|\tau H L^{-1}\right\|^2},$$

то алгоритм сходится к решению (18).

Нетрудно видеть, что это градиентный алгоритм поиска стационарной точки расширенного функционала $\tilde{J}^j(\varphi, r, \varphi^*)$.

Замечание 3. При больших $\alpha > \left\|\tau H L^{-1}\right\|^2$ можно использовать более простой итерационный процесс

$$L\varphi_{n+1} = f + \frac{\tau}{2\alpha}\varphi_{n+1}^*,$$
$$L^*\varphi_{n+1}^* = -2\tau H^*(H\varphi_n - I^j).$$

Использование итерационных методов при решении обратных задач широко распространено из-за их универсальности. Например, итерации возникают в случае одновременной идентификации источника на временных интервалах длиннее одного шага, как это происходит в семействах методов типа 4DVAR со слабыми или сильными ограничениями [15, 21, 24].

Замечание 4. С точки зрения методов решения обратных задач существует несколько способов достижения компромисса между моделью процессов и данными измерений. Здесь используется подход с добавлением к целевому функционалу стабилизатора $\alpha\|r\|^2$. Это обусловлено тем, что для решения задачи (9), (10) мы строим безытерационный алгоритм. Если для минимизации предполагается использовать итерационный алгоритм, то можно положить $\alpha = 0$ и для решения обратных задач использовать подход на основе итеративной регуляризации [4]. В качестве начального приближения нужно выбрать решение задачи без усвоения (в данном случае $r = 0$), а остановку итераций осуществлять по величине невязки $\left\|H^j\varphi - I^j\right\|^2$. Заметим, что оба подхода позволяют выбрать единственное решение из множества решений некорректной задачи обращения оператора измерений (1).

4. Исследование эффективности алгоритма усвоения данных

Траектории системы без усвоения ($r = 0$) и “реальной” системы расходятся в фазовом пространстве за счет разницы в начальных данных и добавочного источника на каждом шаге по времени. Точное решение j-й локальной обратной задачи имеет вид:

$$\tau\check{r}^1 := \left(\bar{\varphi}^0 - \varphi^0\right) + \tau\bar{r}^1, \quad \tau\check{r}^m := \tau\bar{r}^m, \quad m = 1, \ldots, j.$$

В случае задачи последовательного усвоения данных точным решением на каждом шаге будет управление, которое полностью компенсирует как ошибку, накопленную на предыдущих шагах процесса, так и привнесенную на шаге j:

$$\tau\hat{r}^j := \left(\bar{\varphi}^{j-1} - \varphi^{j-1}\right) + \tau\bar{r}^j. \tag{27}$$

Теперь выясним, как соотносятся τr^j и $\tau\hat{r}^j$. Для этого введем в рассмотрение оператор $S = \tau H L^{-1}$ и его разложение Шмидта (аналог сингулярного разложения для матриц). По теореме Гильберта–Шмидта для оператора S верно представление

$$S = \sum_{k=1}^{M} u_k s_k \left\langle v_k, . \right\rangle_X, \qquad S^* = \sum_{k=1}^{M} v_k s_k \left\langle u_k, . \right\rangle_Y,$$

где $\{v_k\}_{k=1,\ldots,M}$ и $\{u_k\}_{k=1,\ldots,M}$ — ортонормированные системы в X и Y, соответственно упорядоченные по убыванию s-чисел (сингулярных чисел) оператора S, $s_k > 0$, $M = \dim Y < \dim X$. В силу невырожденности оператора L^{-1}, $\dim \mathrm{Ker} S = \dim \mathrm{Ker} H$. Ортогонально дополним $\{v_k\}_{k=1,\ldots,M}$ до базиса X и пусть $s_k = 0$, $k = M+1, \ldots, \dim X$. Определим для $x \in X$ проекции на ядро S и его ортогональное дополнение

$$x_{\parallel} = \sum_{k=M+1}^{\dim X} v_k \left\langle x, v_k \right\rangle, \qquad x_{\perp} = \sum_{k=1}^{M} v_k \left\langle x, v_k \right\rangle.$$

Лемма 3. *Пусть $\bar{\varphi}^j$ удовлетворяет (5), (6) и φ^j — (19), тогда, если на шаге j доступны данные измерений, то*

$$\tau\hat{r}^j - \tau r^j = \sum_{k=1}^{M} v_k \left(\frac{\alpha}{\alpha + s_k^2} \left\langle v_k, \tau\hat{r}^j \right\rangle_X + \frac{s_k^2}{\alpha + s_k^2} \frac{\left\langle u_k, \tau\delta I^j \right\rangle_Y}{s_k} \right) + \tau\hat{r}^j_{\parallel},$$

$$\left\| \tau\hat{r}^j_{\perp} - \tau r^j \right\| \leq \frac{\alpha}{\alpha + s_M^2} \left\| \tau\hat{r}^j_{\perp} \right\| + \max_{k=1,\ldots,M} \frac{s_k}{\alpha + s_k^2} \tau\delta^j,$$

$$\left\| \bar{\varphi}^j - \varphi^j \right\| \leq \left\| L^{-1} \right\| \left(\frac{\alpha}{\alpha + s_M^2} \left\| \tau\hat{r}^j_{\perp} \right\| + \max_{k=1,\ldots,M} \frac{s_k}{\alpha + s_k^2} \tau\delta^j + \left\| \tau\hat{r}^j_{\parallel} \right\| \right),$$

$$I^j - H\varphi^j = \sum_{k=1}^{M} u_k \left(\alpha \frac{s_k \left\langle v_k, \hat{r}^j \right\rangle_X + \left\langle u_k, \delta I^j \right\rangle_Y}{\alpha + s_k^2} \right),$$

иначе для шага j без усвоения

$$\tau r^j = 0$$

и

$$\left\| \bar{\varphi}^j - \varphi^j \right\| \leq \left\| L^{-1} \right\| \left\| \tau\hat{r}^j \right\|.$$

Доказательство. Рассмотрим разность траекторий

$$L\ \left(\bar{\varphi}^j-\varphi^j\right)=\left(\bar{\varphi}^{j-1}-\varphi^{j-1}\right)+\tau\left(\bar{r}^j-r^j\right)=\tau\hat{r}^j-\tau r^j.$$

Так как (19) при исключении φ^* эквивалентно (15), то подставим в (15) соотношение

$$\varphi^j=L^{-1}\left(F^j+\tau r^j\right),$$

подействуем оператором $(L^*)^{-1}$ на получившееся уравнение. Перенесем слагаемые с F^j в правую часть

$$\left(\alpha E+\tau^2\left(HL^{-1}\right)^*HL^{-1}\right)\tau r^j=-\tau^2\left(HL^{-1}\right)^*HL^{-1}F^j+\tau^2\left(HL^{-1}\right)^*I^j,$$

где E — единичный оператор. Используем обозначение S, тогда

$$(\alpha E+S^*S)\,\tau r^j=-S^*SF^j+\tau S^*I^j. \tag{28}$$

Теперь воспользуемся формулой для оператора измерений и определением $\bar{\varphi}^j$:

$$I^j=HL^{-1}\left(\bar{\varphi}^{j-1}+\tau f^j+\tau\ \bar{r}^j\right)+\delta I^j=\frac{1}{\tau}S\left(\bar{\varphi}^{j-1}+\tau f^j+\tau\ \bar{r}^j\right)+\delta I^j.$$

Подставляя его в (28) и раскрывая обозначение F^j, получим

$$(\alpha E+S^*S)\,\tau r^j=S^*S\left(\bar{\varphi}^{j-1}-\varphi^{j-1}+\tau\bar{r}^j\right)+\tau S^*\delta I^j$$

или

$$\tau r^j=(\alpha E+S^*S)^{-1}\left(S^*S\tau\hat{r}^j+\tau S^*\delta I^j\right).$$

Следовательно,

$$\tau\hat{r}^j-\tau r^j=(\alpha E+S^*S)^{-1}\left(\alpha\tau\hat{r}^j-\tau S^*\delta I^j\right). \tag{29}$$

Тогда

$$\alpha\left(\alpha E+S^*S\right)^{-1}\tau\hat{r}^j=\sum_{k=1}^{M}v_k\left(\frac{\alpha}{\alpha+s_k^2}\right)\left\langle v_k,\tau\hat{r}^j\right\rangle_X+\sum_{k=M+1}^{\dim X}v_k\left\langle v_k,\tau\hat{r}^j\right\rangle_X, \tag{30}$$

$$(\alpha E+S^*S)^{-1}\left(\tau S^*\delta I^j\right)=\sum_{k=1}^{M}v_k\left(\frac{s_k}{\alpha+s_k^2}\right)\left\langle u_k,\tau\delta I^j\right\rangle_Y. \tag{31}$$

Подставляя (30), (31) в (29), получим

$$\tau\hat{r}^j-\tau r^j=\sum_{k=1}^{M}v_k\left(\frac{\alpha}{\alpha+s_k^2}\left\langle v_k,\tau\hat{r}^j\right\rangle_X+\frac{s_k^2}{\alpha+s_k^2}\frac{\left\langle u_k,\tau\delta I^j\right\rangle_Y}{s_k}\right)+\sum_{k=M+1}^{\dim X}v_k\left\langle v_k,\tau\hat{r}^j\right\rangle_X.$$

Верны оценки:

$$\left\|\sum_{k=1}^{M}v_k\left(\frac{\alpha}{\alpha+s_k^2}\left\langle v_k,\tau\hat{r}^j\right\rangle_X\right)\right\|\le\frac{\alpha}{\alpha+s_M^2}\left\|\tau\hat{r}^j_\perp\right\|,$$

$$\left\|\sum_{k=1}^{M}v_k\left(\frac{s_k^2}{\alpha+s_k^2}\frac{\left\langle u_k,\tau\delta I^j\right\rangle_Y}{s_k}\right)\right\|\le\max_{k=1,\dots,M}\frac{s_k}{\alpha+s_k^2}\tau\delta^j.$$

Откуда

$$\left\|\tau\hat{r}_{\perp}^{j}-\tau r^{j}\right\| \leq \frac{\alpha}{\alpha+s_M^2}\left\|\tau\hat{r}_{\perp}^{j}\right\| + \max_{k=1,\dots,M}\frac{s_k}{\alpha+s_k^2}\tau\delta^j$$

и

$$\left\|\bar{\varphi}^{j}-\varphi^{j}\right\| \leq \left\|L^{-1}\right\|\left(\frac{\alpha}{\alpha+s_M^2}\left\|\tau\hat{r}_{\perp}^{j}\right\| + \max_{k=1,\dots,M}\frac{s_k^2}{\alpha+s_k^2}\frac{1}{s_k}\tau\delta^j\right)+\left\|L^{-1}\right\|\left\|\tau\hat{r}_{\|}^{j}\right\|.$$

Далее

$$I^j - H\varphi^j = \Big(S\left(\alpha E+S^*S\right)^{-1}\left(\alpha\hat{r}^j\right)\Big)+\Big(E-S\left(\alpha E+S^*S\right)^{-1}S^*\Big)\,\delta I^j,$$

откуда

$$I^j - H\varphi^j = \sum_{k=1}^{M} u_k\left(\alpha\frac{s_k\left\langle v_k,\hat{r}^j\right\rangle_X+\left\langle u_k,\delta I^j\right\rangle_Y}{\alpha+s_k^2}\right). \qquad \square$$

Лемма показывает соотношение между точным решением и результатом работы алгоритма последовательного вариационного усвоения данных. В частности, можно заключить, что алгоритм усвоения данных может в лучшем случае восстановить $\tau\hat{r}_{\perp}^{j}$, что соответствует нормальному решению (20). Увеличение числа измерений $\dim Y$ приводит к уменьшению размерности ядра оператора S, однако при этом могут убывать и минимальные сингулярные числа s_M. В этом случае чувствительность решений к погрешностям измерений может увеличиваться.

Если решение (19) известно приближенно (например, получено итерационным методом (23)–(26)), то в данной лемме нужно учитывать дополнительное слагаемое, описывающее разницу между решением (19) и полученным приближением.

Назовем систему с усвоением эффективной (т. е. более эффективной, чем система без усвоения), если выполняется соотношение

$$\left\|\tau\hat{r}_{\perp}^{j}-\tau r^{j}\right\| \leq \left\|\tau\hat{r}_{\perp}^{j}\right\|.$$

Замечание 5. В теоретически важном случае $\delta^j = 0$ при $\alpha \to 0+0$, $\tau r^j \to \tau\hat{r}_{\perp}^{j}$ (случай $\delta^j = 0$ подробно разбирается в [1], в том числе и с аналогичными выкладками на основе сингулярного разложения). В случае неточных данных, при $\alpha \to 0+0$:

$$\tau r^j \to \tau\hat{r}_{\perp}^{j} - \sum_{k=1}^{M} v_k\frac{\left\langle u_k,\tau\delta I^j\right\rangle_Y}{s_k}, \qquad \frac{\tau\delta^j}{s_1} \leq \left\|\sum_{k=1}^{M} v_k\frac{\left\langle u_k,\tau\delta I^j\right\rangle_Y}{s_k}\right\| \leq \frac{\tau\delta^j}{s_M},$$

т. е. если шум относительно невелик, $\frac{\tau\delta^j}{s_M} < \left\|\tau\hat{r}_{\perp}^{j}\right\|$, то система усвоения эффективна и при $\alpha \to 0+0$. При этом возникают сложности с решением (22) из-за деления на малые α, и поэтому для обеспечения корректности вычислений желательно использовать специальные алгоритмы. При $\frac{\tau\delta^j}{s_1} > \left\|\tau\hat{r}_{\perp}^{j}\right\|$ выбор параметра $\alpha \to 0+0$ становится неэффективным. Вне зависимости от величины ошибок измерений при $\alpha \to 0+0$ невязка $\left\|I^j - H\varphi^j\right\| \to 0$, что и характеризует это правило выбора α, прежде всего, как алгоритм воспроизведения моделью данных измерений (или решения соответствующей задачи управления). Если же $\alpha \to \infty$, то $\tau r^j \to 0$, и решение с усвоением сходится к решению без усвоения.

Замечание 6. В работе [25] можно найти аналоги данного утверждения для метода 3DVAR и системы усвоения с “точной” моделью процессов.

5. Заключение

В работе рассмотрены последовательные вариационные алгоритмы со слабыми ограничениями для решения задачи усвоения данных, определяемой как последовательность связанных обратных задач. Такой подход открывает возможности для применения обширного класса методов и алгоритмов, уже разработанных для решения обратных задач.

В рассматриваемых вариационных методах усвоения данных математическая модель процессов является регуляризатором для некорректной задачи обращения операторов измерений. Тем самым предлагается возможный класс физически оправданных регуляризаторов в формализме теории А.Н. Тихонова.

Получены теоретические оценки близости результатов работы представленного последовательного вариационного алгоритма к точному решению задачи усвоения данных.

Отдельно рассмотрен случай усвоения данных измерений функций состояния в точках наблюдений в модели транспорта в квази-одномерном варианте. Здесь решение оптимизационных задач, в рамках рассматриваемого алгоритма, получается без итераций. Это позволяет вычислительно эффективно согласовать, по принципу невязки, параметр регуляризации с точностью данных. В общем случае, если для решения оптимизационных задач не удается построить прямой алгоритм, то лучше обратиться к методам итеративной регуляризации вместо регуляризации по Тихонову.

Алгоритмы, рассмотренные здесь, являются базовым вычислительным ядром системы усвоения данных в контексте общей схемы расщепления нестационарной трехмерной модели транспорта и трансформации атмосферной химии. Предлагаемые алгоритмы дают основу для создания вычислительной технологии усвоения данных наблюдений в “реальном” времени.

Благодарности. Авторы благодарят рецензентов за внимание к рукописи и сделанные замечания, которые позволили улучшить текст статьи.

Литература

1. **Агошков В.И.** Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. — М.: ИВМ РАН, 2003.
2. **Бенсусан А., Лионс Ж.-Л., Темам Р.** Методы декомпозиции, координации и их приложения // Методы вычислительной математики. — Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние. — 1975. — С. 144–274.
3. **Брайсон А., Ю Ши Хо** Прикладная теория оптимального управления. — М.: Мир, 1972.
4. **Вайникко Г.М., Веретенников А.Ю.** Итерационные процедуры в некорректных задачах. — М.: Наука, 1986.
5. **Годунов С.К., Антонов А.Г., Кирилюк О.П., Костин В.И.** Гарантированная точность решения систем линейных уравнений в евклидовых пространствах. — Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1988.
6. **Лионс Ж.-Л.** Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. — М.: Мир, 1972.
7. **Марчук Г.И.** О постановке некоторых обратных задач // Доклады АН СССР. — 1964. — Т. 156, № 3. — С. 503–506.
8. **Марчук Г.И.** Численное решение задач динамики атмосферы и океана. — Л.: Гидрометеоиздат, 1974.
9. **Марчук Г.И.** Методы вычислительной математики. — М.: Наука, 1989.

10. **Морозов В.А.** О принципе невязки при решении операторных уравнений методом регуляризации // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1968. — Т. 8, № 2. — С. 295–309.

11. **Пененко А.В.** Некоторые теоретические и прикладные вопросы последовательного вариационного усвоения данных // Вычислительные технологии: Избранные доклады Международной конференции по измерениям, моделированию и информационным системам для изучения окружающей среды: ENVIROMIS-2006 (Томск, Россия), часть 2. — 2006. — Т. 11. — С. 35–40.

12. **Пененко В.В.** Вычислительные аспекты моделирования динамики атмосферных процессов и оценки влияния различных факторов на динамику атмосферы // Некоторые проблемы вычислительной и прикладной математики / М.М. Лаврентьев. — Новосибирск: Наука, 1975. — С. 61–77.

13. **Пененко В.В.** Методы численного моделирования атмосферных процессов. — Л.: Гидрометеоиздат, 1981.

14. **Пененко В.В., Образцов Н.Н.** Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. — 1976. — № 11. — С. 1–11.

15. **Пененко В.В.** Системная организация математических моделей для задач физики атмосферы, океана и охраны окружающей среды. — Новосибирск, 1985. — (Препринт / АН СССР. Сиб. отд-ние. ВЦ; 619).

16. **Пененко В.В.** Вариационные методы усвоения данных и обратные задачи для изучения атмосферы, океана и окружающей среды // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2009. — Т. 12, № 4. — С. 341–351.

17. **Пененко А.В., Пененко В.В.** Прямой метод вариационного усвоения данных для моделей конвекции-диффузии на основе схемы расщепления //Вычислительные технологии. — 2014. — Т. 19, № 4. — С. 69–83.

18. **Пененко В.В., Цветова Е.А., Пененко А.В.** Методы совместного использования моделей и данных наблюдений в рамках вариационного подхода для прогнозирования погоды и качества состава атмосферы // Метеорология и гидрология. — 2015. — № 6. — С. 13–24.

19. **Самарский А.А., Вабищевич П.Н.** Аддитивные схемы для задач математической физики. — М.: Наука, 2001.

20. **Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.** Численные методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1990.

21. **Шутяев В.П.** Операторы управления и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. — М.: Наука, 2001.

22. **Blum J., Le DImet F.-X., and Navon I.M.** Data assimilation for geophysical fluids // Handbook of numerical analysis / Elsevier Science. 2008. — Vol. 14: Special Volume. — P. 377–434.

23. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H. et al.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmos. Chem. Phys. — 2015. — Vol. 15, № 10. — P. 5325–5358. — www.atmos-chem-phys.net/15/5325/2015/ doi:10.5194/acp-15-5325-2015.

24. **Elbern H., Strunk A., Schmidt H., and Talagrand O.** Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion // Atmos. Chem. Phys. — 2007. — Vol. 7. — P. 3749–3769.

25. **Freitag M.A., Potthast R.W.E.** Synergy of inverse problems and data assimilation techniques // Large Scale Inverse Problems Computational Methods and Applications in the Earth Sciences: Radon Series on Computational and Applied Mathematics. — 2013. — Vol. 13. — P. 1–54.

26. **Kalman R.E.** A new approach to linear filtering and prediction problems // Transactions of the ASME–Journal of Basic Engineering. — 1960. — Vol. 82. Ser. D. — P. 35–45.

27. **Kukkonen J. et al.** A review of operational, regional-scale, chemical weather forecasting models in Europe // Atmos. Chem. Phys. — 2012. — Vol. 12. — P. 1–87.
28. **Lahoz W., Khattarov B., and Menhard R.** Data Assimilation. Making Sense of Observations. — Vol. XIV. — Springer, 2010.
29. **Le Dimet F.-X., Talagrand O.** Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus A. — 1986. — Vol. 38A. — P. 97–110.
30. **Marchuk G.I., Penenko V.V.** Application of perturbation theory to problems of simulation of atmospheric processes // Monsoon dynamics (Joint ITAM/IUGG Intern. Symp. on Monsoon dynamics, Delhi, 1977) / J. Lighthill and R. Pearce. — New York: Cambridge University Press, 1981. — P. 639–655.
31. **Marchuk G.I., Penenko V.V.** Application of optimization methods to the problem of mathematical simulation of atmospheric processes and environment // Modelling and optimization of complex systems: Proc. of the IFIP-TC7 Working conf. / G.I. Marcuk. — New York: Springer, 1978. — P. 240–252.
32. **Navon I.M.** Data assimilation for numerical weather prediction: a review // Data Assimilation for Atmospheric, Oceanic and Hydrologic Applications. — Vol. 1. — Springer, 2009. — P. 21–65.
33. **Penenko V.V., Tsvetova E.A., and Penenko A.V.** Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies // Computers and Mathematics with Applications. — 2014. — Vol. 67, iss. 12. — P. 2240–2256. — DOI: 10.1016/j.camwa.2014.04.004.
34. **Penenko A., Penenko V., Nuterman R., et al.** Direct variational data assimilation algorithm for atmospheric chemistry data with transport and transformation model // Proc. SPIE Vol. 9680, 21st International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics. (November 19, 2015). — P. 968076-1–968076-12. — DOI: 10.1117/12.2206008.
35. **Talagrand O., Courtier P.** Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation // Quart. J. Roy. Meteor. Soc. — 1987. — Vol. 113, № I: Theory. — P. 1311–1328.
36. **Sandu A., Tianfeng C.** Chemical data assimilation — an overview // Atmosphere. — 2011. — Vol. 2. — P. 426–463.

Поступила в редакцию 4 декабря 2015 г.,
в окончательном варианте 30 мая 2016 г.

Литература в транслитерации

1. **Agoshkov V.I.** Metody optimal'nogo upravleniya i sopryazhennykh uravnenii v zadachakh matematicheskoi fiziki. — M.: IVM RAN, 2003.
2. **Bensusan A., Lions Zh.-L., Temam R.** Metody dekompozicii, koordinacii i ikh prilozheniya // Metody vychislitel'noi matematiki. — Novosibirsk: Nauka. Sib. otd-nie. — 1975. — S. 144–274.
3. **Brayson A., Yu Shi Kho** Prikladnaya teoriya optimal'nogo upravleniya. — M.: Mir, 1972.
4. **Vainikko G.M., Veretennikov A.Yu.** Iteracionnye procedury v nekorrektnykh zadachakh. — M.: Nauka, 1986.
5. **Godunov S.K., Antonov A.G., Kirilyuk O.P., Kostin V.I.** Garantirovannaya tochnost' resheniya sistem lineynykh uravnenii v evklidovykh prostranstvakh. — Novosibirsk: Nauka. Sib. otd-nie, 1988.
6. **Lions Zh.-L.** Optimal'noe upravlenie sistemami, opisyvaemymi uravneniyami s chastnymi proizvodnymi. — M.: Mir, 1972.
7. **Marchuk G.I.** O postanovke nekotorykh obratnykh zadach // Doklady AN SSSR. — 1964. — T. 156, № 3. — S. 503–506.

8. **Marchuk G.I.** Chislennoe reshenie zadach dinamiki atmosfery i okeana. — L.: Gidrometeoizdat, 1974.

9. **Marchuk G.I.** Metody vychislitel'noi matematiki. — M.: Nauka, 1989.

10. **Morozov V.A.** O principe nevyazki pri reshenii operatornykh uravnenii metodom regulyarizacii // Zhyrn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1968. — T. 8, № 2. — S. 295–309.

11. **Penenko A.V.** Nekotorye teoreticheskie i prikladnye voprosy posledovatel'nogo variacionnogo usvoeniya dannykh // Vychislitel'nye tekhnologii: Izbrannye doklady Mezhdunarodnoy konferencii po izmereniyam, modelirovaniyu i informacionnym sistemam dlya izucheniya okruzhayushchei sredy: ENVIROMIS-2006 (Tomsk, Rossiya), chast' 2. — 2006. — T. 11. — C. 35–40.

12. **Penenko V.V.** Vychislitel'nye aspekty modelirovaniya dinamiki atmosfernykh processov i ocenki vliyaniya razlichnykh faktorov na dinamiku atmosfery // Nekotorye problemy vychislitel'noi i prikladnoi matematiki / M.M. Lavrent'ev. — Novosibirsk: Nauka, 1975. — C. 61–77.

13. **Penenko V.V.** Metody chislennogo modelirovaniya atmosfernykh processov. — L.: Gidrometeoizdat, 1981.

14. **Penenko V.V., Obrazcov N.N.** Variacionnyi metod soglasovaniya polei meteorologicheskikh elementov // Meteorologiya i gidrologiya. — 1976. — № 11. — C. 1–11.

15. **Penenko V.V.** Sistemnaya organizaciya matematicheskikh modelei dlya zadach fiziki atmosfery, okeana i okhrany okruzhayushchei sredy. — Novosibirsk, 1985. — (Preprint / AN SSSR. Sib. otd-nie. VC; 619).

16. **Penenko V.V.** Variacionnye metody usvoeniya dannykh i obratnye zadachi dlya izucheniya atmosfery, okeana i okruzhayushchei sredy // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2009. — T. 12, № 4. — C. 341–351.

17. **Penenko A.V., Penenko V.V.** Pryamoi metod variacionnogo usvoeniya dannykh dlya modelei konvekcii-diffuzii na osnove skhemy rasshchepleniya // Vychislitel'nye tekhnologii. — 2014. — T. 19, № 4. — S. 69–83.

18. **Penenko V.V., Tsvetova E.A., Penenko A.V.** Metody sovmestnogo ispol'zovaniya modelei i dannykh nablyudenii v ramkakh variacionnogo podkhoda dlya prognozirovaniya pogody i kachestva sostava atmosfery // Meteorologiya i gidrologiya. — 2015. — № 6. — S. 13–24.

19. **Samarskii A.A., Vabishchevich P.N.** Additivnye skhemy dlya zadach matematicheskoy fiziki. — M.: Nauka, 2001.

20. **Tikhonov A.N., Goncharskii A.V., Stepanov V.V., Yagola A.G.** Chislennye metody resheniya nekorrektnykh zadach. — M.: Nauka, 1990.

21. **Shutyaev V.P.** Operatory upravleniya i iteracionnye algoritmy v zadachakh variacionnogo usvoeniya dannykh. — M.: Nauka, 2001.

22. **Blum J., Le DImet F.-X., and Navon I.M.** Data assimilation for geophysical fluids // Handbook of numerical analysis / Elsevier Science. 2008. — Vol. 14: Special Volume. — P. 377–434.

23. **Bocquet M., Elbern H., Eskes H. et al.** Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models // Atmos. Chem. Phys. — 2015. — Vol. 15, № 10. — P. 5325–5358. — www.atmos-chem-phys.net/15/5325/2015/ doi:10.5194/acp-15-5325-2015.

24. **Elbern H., Strunk A., Schmidt H., and Talagrand O.** Emission rate and chemical state estimation by 4-dimensional variational inversion // Atmos. Chem. Phys. — 2007. — Vol. 7. — P. 3749–3769.

25. **Freitag M.A., Potthast R.W.E.** Synergy of inverse problems and data assimilation techniques // Large Scale Inverse Problems Computational Methods and Applications in the Earth Sciences: Radon Series on Computational and Applied Mathematics. — 2013. — Vol. 13. — P. 1–54.

26. **Kalman R.E.** A new approach to linear filtering and prediction problems // Transactions of the ASME–Journal of Basic Engineering. — 1960. — Vol. 82. Ser. D. — P. 35–45.
27. **Kukkonen J. et al.** A review of operational, regional-scale, chemical weather forecasting models in Europe // Atmos. Chem. Phys. — 2012. — Vol. 12. — P. 1–87.
28. **Lahoz W., Khattarov B., and Menhard R.** Data Assimilation. Making Sense of Observations. — Vol. XIV. — Springer, 2010.
29. **Le Dimet F.-X., Talagrand O.** Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus A. — 1986. — Vol. 38A. — P. 97–110.
30. **Marchuk G.I., Penenko V.V.** Application of perturbation theory to problems of simulation of atmospheric processes // Monsoon dynamics (Joint ITAM/IUGG Intern. Symp. on Monsoon dynamics, Delhi, 1977) / J. Lighthill and R. Pearce. — New York: Cambridge University Press, 1981. — P. 639–655.
31. **Marchuk G.I., Penenko V.V.** Application of optimization methods to the problem of mathematical simulation of atmospheric processes and environment // Modelling and optimization of complex systems: Proc. of the IFIP-TC7 Working conf. / G.I. Marcuk. — New York: Springer, 1978. — P. 240–252.
32. **Navon I.M.** Data assimilation for numerical weather prediction: a review // Data Assimilation for Atmospheric, Oceanic and Hydrologic Applications. — Vol. 1. — Springer, 2009. — P. 21–65.
33. **Penenko V.V., Tsvetova E.A., and Penenko A.V.** Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies // Computers and Mathematics with Applications. — 2014. — Vol. 67, iss. 12. — P. 2240–2256. — DOI: 10.1016/j.camwa.2014.04.004.
34. **Penenko A., Penenko V., Nuterman R., et al.** Direct variational data assimilation algorithm for atmospheric chemistry data with transport and transformation model // Proc. SPIE Vol. 9680, 21st International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics. (November 19, 2015). — P. 968076-1–968076-12. — DOI: 10.1117/12.2206008.
35. **Talagrand O., Courtier P.** Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation // Quart. J. Roy. Meteor. Soc. — 1987. — Vol. 113, № I: Theory. — P. 1311–1328.
36. **Sandu A., Tianfeng C.** Chemical data assimilation — an overview // Atmosphere. — 2011. — Vol. 2. — P. 426–463.