

УДК 517.988, 519.62

Идентификация источника в уравнении Смолуховского с использованием ансамбля решений сопряженного уравнения*

А.В. Пененко^{1,2}, А.Б. Салимова^{1,2}

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

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

E-mails: a.penenko@yandex.ru (Пененко А.В.), aksalimova@yandex.ru (Салимова А.Б.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 2, Vol. 13, 2020.

Пененко А.В., Салимова А.Б. Идентификация источника в уравнении Смолуховского с использованием ансамбля решений сопряженного уравнения // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд.-ние. — Новосибирск, 2020. — Т. 23, № 2. — С. 183–199.

Алгоритм идентификации источников в системах нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений продукции–деструкции применен к обратной задаче для дискретизированного уравнения Смолуховского. Неизвестная функция источника оценивается по временным рядам измерений концентраций частиц определенных размеров. На основе ансамбля решений сопряженных уравнений построен оператор чувствительности, связывающий возмущения искомых параметров модели с возмущениями измеряемых величин. Он сводит обратную задачу к семейству квазилинейных операторных уравнений. Для решения уравнений применяется алгоритм типа Ньютона–Канторовича с использованием r -псевдообратных матриц. Численно изучены эффективность и свойства алгоритма.

DOI: 10.15372/SJNM20200206

Ключевые слова: уравнение Смолуховского, обратная задача идентификации источников, метод Ньютона–Канторовича, сопряженные уравнения, оператор чувствительности.

Penenko A.V., Salimova A.B. Source identification for the Smoluchowski equation using an ensemble of the adjoint equation solutions // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2020. — Vol. 23, № 2. — P. 183–199.

A source identification algorithm for the systems of nonlinear ordinary differential equations of the production-destruction type is applied to the inverse problem for the discretized Smoluchowski equation. An unknown source function is estimated by time series of measurements of the specific size particles concentration. Based on an ensemble of adjoint equations solutions, the sensitivity operator is constructed that links the perturbations of the sought for model parameters with perturbations of the measured values. This reduces the inverse problem to a family of quasilinear operator equations. To solve the equations, an algorithm of the Newton–Kantorovich type is used with r -pseudoinverse matrices. The efficiency and properties of the algorithm are numerically studied.

Keywords: Smoluchowsky equation, inverse source problem, Newton–Kantorovich method, adjoint equations, sensitivity operator.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 17-71-10184 (в части разработки алгоритмов и их исследования)).

1. Введение

Аэрозольные частицы, содержащиеся в атмосфере во взвешенном состоянии, загрязняют воздух и негативно влияют на здоровье человека [1]. Не все источники таких выбросов известны и учтены. Для оценок пространственного распределения аэрозолей по данным разовых измерений и для прогнозирования последствий загрязнения необходимо идентифицировать их источник.

Для моделирования динамики аэрозольных популяций применяется (см., например, [2]) уравнение Смолуховского [3–5]. Теоретическое исследование свойств уравнения Смолуховского проведено в [6]. В работе [7] изучены вопросы моделирования динамики газовых и аэрозольных компонент. В работе [8] представлены эффективные способы решения прямой задачи для уравнения Смолуховского. Исследования свойств дискретных уравнений типа Смолуховского можно найти в [9].

На основе прямых задач и доступных данных измерений можно сформулировать обратную задачу. Часто для решения нелинейных обратных задач используется оптимизационный подход, состоящий в минимизации некоторого целевого функционала. В [10] приведены необходимые для реализации градиентных алгоритмов конструкции. В [11] рассматривается вариационная постановка обратной задачи для общего класса эволюционных уравнений, зависящих от условной меры вероятности с приложением к моделям флуктуации. В [11] также можно найти обзор работ по данному направлению.

Альтернативный подход для решения обратных задач был предложен Г.И. Марчуком [12, 13]. Он состоит в сведении обратной задачи к системе уравнений с матрицей, определяемой набором сопряженных функций, соответствующих конечному числу различных линейных функционалов от функции состояния. В [14, 15] этот подход применен к задаче поиска источников для линейной модели переноса примесей в атмосфере. Для того чтобы подчеркнуть независимость используемых решений сопряженного уравнения, будем называть их набор “ансамблем решений” по аналогии с ансамблевыми алгоритмами усвоения данных [16], в которых используются наборы независимых решений прямой задачи. Развитие технологии параллельных вычислений сделало возможным эффективную реализацию ансамблевых методов.

В рамках вариационного подхода можно также получать (приближенные) операторные формулировки обратной задачи, например в [17] операторное уравнение строится на основе соотношения оптимальности (Эйлера–Лагранжа) для вариационной задачи по условной минимизации некоторого целевого функционала, содержащего невязку между смоделированными и измеренными значениями, а также некоторые регуляризаторы. То есть задача сначала регуляризуется, а затем регуляризованный вариант сводится к операторному уравнению. В отличие от этого, мы будем строить семейство операторных уравнений, которым удовлетворяет решение исходной обратной задачи, а затем проводить их регуляризацию в процессе решения. В связи с использованием соотношения оптимальности также стоит упомянуть метод представителей [18], который состоит в построении ансамбля функций (называемых представителями) на основе декомпозиции соотношения оптимальности. Для вычисления каждого представителя требуется решить систему из прямой и сопряженной задач. Существуют другие приложения ансамблей решений сопряженных уравнений для задач в вариационной формулировке. В случаях когда решение сопряженной задачи, необходимой для вычислений градиента целевого функционала, не зависит от решения прямой задачи, то вместо одной последовательно решаемой сопряженной задачи можно параллельно с прямой решать ансамбль сопряженных задач [19].

В работе рассматривается обратная задача идентификации источников для дискрети-

зированной уравнения Смолуховского. Данные измерений доступны в виде временных рядов концентраций частиц определенных размеров. Для численного решения обратной задачи временной ряд измерений необходимо свести к некоторому конечному набору значений. Это можно сделать, рассматривая ряд как точечные измерения [20] или как элемент функционального пространства [21]. При работе с данными типа изображений высокого разрешения решение сопряженных уравнений для каждого пикселя является технически сложной задачей, требующей больших затрат памяти и вычислительных ресурсов. С другой стороны, ценность каждого элемента данных измерений (изображений) в контексте решаемых задач неизвестна. В [21] использована идея из [22] о предварительном переходе к относительно небольшому набору “ключевых особенностей изображений”. Для этого применяется “оператор извлечения структуры изображения”. Мы будем использовать “оператор извлечения структуры” на основе преобразования Фурье. В данном случае выбор “ключевых особенностей” соответствует выбору базиса в пространстве результатов измерений, на которые будут предварительно проектироваться исходные изображения для последующей обработки полученных проекций.

В пункте 2 формулируется задача Коши для дискретизированного по размерам частиц непрерывного уравнения Смолуховского и вводятся необходимые для дальнейших рассуждений функции и операторы. Далее записана дискретно-аналитическая схема и даны определения прямой и обратной задач. В пункте 3 на основе представленных утверждений находятся сопряженные функции и оператор чувствительности, приводится семейство операторных уравнений, которому удовлетворяет решение обратной задачи. В пункте 4 для решения операторных уравнений рассмотрен алгоритм типа Ньютона–Канторовича. Так как обратная задача является некорректной, получающаяся матрица оператора чувствительности плохо обусловлена, поэтому для регуляризации ее обращения использован подход на основе r -псевдообратных матриц с постепенным увеличением количества используемых компонент сингулярного разложения по мере убывания невязки уравнения. В п. 5 проведен ряд численных экспериментов по идентификации источников при варьировании различных параметров (число узлов сетки, время и т. д.).

Целью данной работы является построение и численное исследование алгоритма решения задачи идентификации источников для дискретизированного уравнения Смолуховского с помощью ансамбля решений сопряженных уравнений, метода типа Ньютона–Канторовича и данных измерений в виде временных рядов отдельных компонент функции состояния модели. Основными результатами работы являются адаптация алгоритма решения обратных задач на основе ансамблей решений сопряженных уравнений к модели Смолуховского и оценка возможности идентификации источников этим алгоритмом.

Работа продолжает цикл исследований [20, 21, 23, 24], являясь их обобщением на случай дискретизированного уравнения Смолуховского. В частности, она является прямым продолжением работы [21], в том числе и по используемым обозначениям. Новыми в данной работе, по сравнению с [21], является приложение алгоритма к уравнениям Смолуховского, а также результаты численного изучения эффективности алгоритма в контексте модели Смолуховского.

2. Постановка задачи

Рассмотрим временной интервал $[0, T]$, конечный интервал размеров частиц $[0, X]$ с сеткой $\omega_x = \{0 < x_1 < \dots < x_{N_c} = X\}$ и задачу Коши для дискретизированного по размерам частиц с использованием квадратур трапеций непрерывного уравнения Смолуховского:

$$\frac{d\varphi_l(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \varphi_i(t) \varphi_{l-i}(t) dx_i - \varphi_l(t) \sum_{i=1}^{N_c} k_{li} \varphi_i(t) dx_i + r_l(t), \quad (1)$$

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

где N_c — количество рассматриваемых размеров частиц $\{x_l\}_{l=1}^{N_c}$, $\varphi_l(t)$ — концентрация частиц, соответствующих l -му размеру x_l в момент времени t , $\varphi(t) \in \mathbb{R}^{N_c}$ — вектор-функция с элементами $\varphi_l(t)$, $r_l(t)$ — функция источника частиц размера x_l в зависимости от времени, и

$$dx_l = \begin{cases} (x_{l+1} - x_l)/2, & l = 1, \\ (x_{l+1} - x_{l-1})/2, & 1 < l < N_c, \\ (x_l - x_{l-1})/2, & l = N_c. \end{cases}$$

Пусть $r \in F \subset L_2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})$, где F — пространство функций источников, k — дискретное ядро коагуляции. Из физического смысла явления коагуляции следует симметричность и положительность ядра $k : k_{li} = k_{il} \geq 0$. Пусть $\Phi \subset L_2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})$ — соответствующее F множество решений задачи (1), (2). Будем считать все функции достаточно гладкими для того, чтобы все последующие выкладки имели смысл.

При введении обозначений

$$P : \begin{cases} [0, T] \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c} \\ \{t, \varphi\} \mapsto \left\{ \sum_{i=1}^{N_c} k_{li} \varphi_i dx_i \right\}_{l=1}^{N_c} \end{cases}, \quad \Pi : \begin{cases} [0, T] \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R}^{N_c} \\ \{t, \varphi\} \mapsto \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \varphi_{l-i} \varphi_i dx_i \right\}_{l=1}^{N_c} \end{cases} \quad (3)$$

система (1), (2) приводится к виду системы продукции–деструкции:

$$\frac{d\varphi_l(t)}{dt} + P_l(t, \varphi(t)) \varphi_l(t) = \Pi_l(t, \varphi(t)) + r_l(t), \quad t \in [0, T], \quad l = 1, \dots, N_c, \quad (4)$$

$$\varphi_l(0) = \varphi_l^0, \quad l = 1, \dots, N_c, \quad (5)$$

где P_l , Π_l — l -е компоненты P , Π соответственно. При этом если $\varphi_l \geq 0$, то $P_l(t, \varphi) \geq 0$ и $\Pi_l(t, \varphi) \geq 0$. Аналогичное представление для модели динамики биоаэрозолей в интегродифференциальной форме использовалось в [25].

Введем на интервале $[0, T]$ расчетную сетку $\omega_t = \{0 = t^1 < t^2 < \dots < t^{N_t} = T\}$ с шагом по времени $\Delta t^{j+0.5} = t^{j+1} - t^j$. Следуя [20], рассмотрим для (4) одностадийную явную дискретно-аналитическую численную схему, известную как QSSA (Quasi Steady State Approximation) [26]:

$$\phi_l^{j+1} = \phi_l^j L^j(P_l(t^j, \phi^j)) + G^j(P_l(t^j, \phi^j))(\Pi_l(t^j, \phi^j) + r_l^j), \quad j = 1, \dots, N_t - 1, \quad (6)$$

$$\phi_l^1 = \phi_l^0, \quad (7)$$

где $l = 1, \dots, N_c$. Эта схема при неотрицательных входных данных и вектор-функциях продукции–деструкции дает неотрицательное решение. Здесь $\phi \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$ является дискретным эквивалентом φ , а операторы $L^j(P)$ и $G^j(P)$ введены для работы с жесткими системами. Используя эти операторы, элементы вектора ϕ разделяют на группы “быстрых”, “средних” и “медленных” в зависимости от их “времени жизни”. Элементы из этих групп обрабатываются по-разному:

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

и $\Delta t = \Delta t^{j+0.5}$.

Определение 1. Прямой задачей будем называть задачу нахождения ϕ из (6), (7) по известным $\phi^0 \in \mathbb{R}^{N_c}$ и $r \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$. Обозначим решение прямой задачи через $\phi[\phi^0, r] \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$.

Пусть функция источника r неизвестна, однако имеется информация о динамике концентраций частиц определенных размеров. Обозначим через L_{meas} набор индексов наблюдаемых размеров частиц. Определим подпространство $\bar{U}_{\text{meas}} \subset \mathbb{R}^{N_c \times N_t}$ и оператор \bar{A} , ставящий в соответствие параметрам прямой задачи набор наблюдаемых временных рядов значений компонент функции состояния ϕ и заменяющий нулями не наблюдаемые компоненты:

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

Рассмотрим следующее преобразование данных измерений, которое обобщает преобразование Фурье. Зададим набор из Ξ функций $\bar{U} = \{\bar{u}_\xi\}_{\xi=1}^\Xi \subset \bar{U}_{\text{meas}}$. Следуя [21], определим дискретные скалярные произведения и оператор “извлечения структуры” [22] (“image to structure operator”) $\bar{H}_{\bar{U}}$:

$$\dots : \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c} \times \mathbb{R}^{N_c} \rightarrow \mathbb{R} \\ \{a, b\} \mapsto a^T \text{diag}(\rho) b = \sum_{l=1}^{N_c} a_l b_l \rho_l \end{cases}, \quad \langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})} : \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1} \times \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1} \rightarrow \mathbb{R} \\ \{h, \phi\} \mapsto \sum_{j=1}^{N_t - 1} \phi^j \cdot h^j \delta t^j \end{cases},$$

$$\bar{H}_{\bar{U}} : \begin{cases} \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1} \rightarrow \mathbb{R}^\Xi \\ \phi \mapsto \sum_{\xi=1}^\Xi \langle \bar{u}_\xi, \phi \rangle_{L^2(0, T; \mathbb{R}^{N_c})} e_\xi \end{cases},$$

где точки “внизу” в обозначении скалярных произведений означают, что в соответствующей записи присутствуют два аргумента: δt^j — некоторые заданные веса по времени, например

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

e_ξ — ξ -й элемент канонического базиса в \mathbb{R}^Ξ , $\rho_l > 0$ — некоторые веса, $\rho = \{\rho_l\}_{l=1}^{N_c}$, $\text{diag}(\rho)$ — диагональная матрица с элементами вектора ρ на диагонали, $\mathbb{R}_\rho^{N_c}$ — евклидово пространство со скалярным произведением \dots, \cdot^T — операция транспонирования. Сопряженная матрица для матрицы $S \in \mathbb{R}^{N_c \times N_c}$ относительно скалярного произведения \dots определяется соотношением $S^* = (\text{diag}(\rho))^{-1} S^T \text{diag}(\rho)$. Зададим некоторое значение $\bar{r}^{(*)} \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$, которое назовем “точным решением обратной задачи”, и определим вектор данных измерений

$$\bar{I} = \bar{A}(\bar{r}^{(*)}) + \delta \bar{I}, \quad (8)$$

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

Определение 2. Обратной задачей идентификации источника назовем задачу нахождения $\bar{r}^{(*)}$ из (8) по ϕ^0, \bar{I}, δ .

3. Построение оператора чувствительности

Для построения оператора чувствительности и семейства квазилинейных уравнений, которым удовлетворяет решение обратной задачи, используем результаты [20, 21]. Сначала приведем уравнение в вариациях. Далее вычислим необходимые для реализации алгоритма операторы, соответствующие рассматриваемой форме уравнения Смолуховского. Это позволяет для рассматриваемой обратной задачи построить сопряженные уравнения и на основе ансамбля их решений сконструировать оператор чувствительности.

Определение 3. Оператором разделенных разностей $\bar{\nabla}$ называется оператор, 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 $\forall t \in [0, T]$ и $\forall \phi, \delta \phi \in \mathbb{R}^{N_c}$ выполняется равенство

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

Лемма 1 (об уравнении в вариациях [20]). Пусть $\phi^{j+1}, \phi^{j+1} + \delta \phi^{j+1} \in \mathbb{R}^{N_c}$ — результаты вычисления по схеме (6), (7), соответствующие значениям функции состояния на предыдущем шаге $\phi^j, \phi^j + \delta \phi^j \in \mathbb{R}^{N_c}$ и источникам $r^j, r^j + \delta r^j \in \mathbb{R}^{N_c}$, тогда уравнение в вариациях имеет вид

$$\delta \phi^{j+1} = W^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta \phi^j, \delta r^j) \delta \phi^j + R^j(t^j, \phi^j) \delta r^j, \quad (9)$$

где

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

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

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

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

иначе

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

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

Определение 4. Введем индикатор $E_i[1, l]$:

$$E_i[1, l] = \begin{cases} 1, & i \in [1, l], \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Чтобы построить уравнение в вариациях для (4), по лемме 1 вычислим операторы разделенных разностей для функций P_l и Π_l .

Лемма 2. Если $P_l(t, \phi)$ и $\Pi_l(t, \phi)$ заданы в виде (3), то

$$\bar{\nabla} P_l(t, \phi + \delta\phi, \phi) = [k_{l1} dx_1, \dots, k_{lN_c} dx_{N_c}], \quad (10)$$

$$(\bar{\nabla} \Pi_l(t, \phi + \delta\phi, \phi))_i = E_i[1, l-1] (k_{l-i,i} \phi_{l-i} dx_i + k_{i,l-i} (\phi_{l-i} + \delta\phi_{l-i}) dx_{l-i}). \quad (11)$$

Доказательство. По определению P :

$$P_l(t, \phi + \delta\phi) - P_l(t, \phi) = \sum_{i=1}^{N_c} k_{li} dx_i \delta\phi_i.$$

Из определения 3 следует равенство (10). Далее распишем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Pi_l(t, \phi + \delta\phi) &= \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} (\phi_{l-i} + \delta\phi_{l-i}) (\phi_i + \delta\phi_i) dx_i \\ &= \sum_{i=1}^{l-1} (k_{l-i,i} \phi_{l-i} \phi_i dx_i + k_{l-i,i} \phi_{l-i} \delta\phi_i dx_i + k_{l-i,i} \delta\phi_{l-i} (\phi_i + \delta\phi_i) dx_i) \\ &= \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \phi_{l-i} \phi_i dx_i + \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \phi_{l-i} \delta\phi_i dx_i + \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \delta\phi_{l-i} (\phi_i + \delta\phi_i) dx_i. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\Pi_l(t, \phi + \delta\phi) - \Pi_l(t, \phi) = \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \phi_{l-i} \delta\phi_i dx_i + \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \delta\phi_{l-i} (\phi_i + \delta\phi_i) dx_i.$$

Во втором слагаемом произведем замену индекса $l-i = m$ и получим

$$\sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \delta\phi_{l-i} (\phi_i + \delta\phi_i) dx_i = \sum_{m=1}^{l-1} k_{m,l-m} \delta\phi_m (\phi_{l-m} + \delta\phi_{l-m}) dx_{l-m}.$$

Переименовывая индекс m в i , получим

$$\begin{aligned} \Pi_l(t, \phi + \delta\phi) - \Pi_l(t, \phi) &= \sum_{i=1}^{l-1} k_{l-i,i} \phi_{l-i} \delta\phi_i dx_i + \sum_{i=1}^{l-1} k_{i,l-i} \delta\phi_i (\phi_{l-i} + \delta\phi_{l-i}) dx_{l-i} \\ &= \sum_{i=1}^{N_c} E_i[1, l-1] (k_{l-i,i} \phi_{l-i} dx_i + k_{i,l-i} (\phi_{l-i} + \delta\phi_{l-i}) dx_{l-i}) \delta\phi_i, \end{aligned}$$

откуда следует второе утверждение леммы. \square

Лемма 3 (о сопряженных уравнениях [21]). Если $\phi = \phi[\phi^0, r]$, $\phi + \delta\phi = \phi[\phi^0 + \delta\phi^0, r + \delta r]$ и задан $h \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$, то верно соотношение

$$\langle \delta\phi, h \rangle_{L_2(0, T; \mathbb{R}_p^{N_c})} = \delta\phi^0 \cdot \psi^0 \delta t^0 + \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \psi^j \delta t^j, \quad (12)$$

где

$$\psi^{j-1} \frac{\delta t^{j-1}}{\delta t^j} = (W^j(t^j, \phi^j, r^j, \delta\phi^j, \delta r^j))^* \psi^j + h^j, \quad j = 1, \dots, N_t, \quad (13)$$

$$\psi^{N_t} = 0, \quad (14)$$

и h^j — столбцы h .

Обозначим через $\psi[r, \delta r, h]$ решение задачи (13), (14). На основе тождества (12) можно получить градиент целевого функционала невязки обратной задачи и приступить к ее решению оптимизационным методом.

Следствие 1 (о градиенте [21]). Если задан функционал

$$J(r) = \sum_{l \in L_{\text{meas}}} \sum_{j=1}^{N_t} (\phi_l^j[\phi^0, r] - I_l^j)^2 \delta t^j \rho_l,$$

то

$$\begin{aligned} J(r + \delta r) - J(r) &= \sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \psi^j[r, 0, h] \delta t^j + \\ &\sum_{j=1}^{N_t-1} \delta r^j \cdot R(t^j, \phi^j) \delta \psi^j[r, \delta r, h] \delta t^j + \sum_{l \in L_{\text{meas}}} \sum_{j=1}^{N_t} (\delta \phi_l^j[r, \delta r])^2 \delta t^j \rho_l, \end{aligned} \quad (15)$$

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

$$h_l^j = \begin{cases} 2(\phi_l^j[\phi^0, r] - I_l^j), & l \in L_{\text{meas}}, \\ 0, & l \notin L_{\text{meas}}. \end{cases}$$

Верхний индекс обозначает слой по времени, а нижний индекс — размер частиц. При условии достаточной гладкости параметров обратной задачи слагаемые во второй строке (15) являются слагаемыми второго порядка малости. Следовательно, в качестве градиента $\nabla_r J$ в $\mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ можно рассматривать

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

Теорема 1 (об операторе чувствительности [21]). Для любых r , $r + \delta r \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ и $\bar{U} \subset \bar{U}_{\text{meas}}$ верно тождество

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

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

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

Как частный случай можно получить параметрическое семейство квазилинейных уравнений, которым удовлетворяет решение обратной задачи.

Следствие 2 (о квазилинейных уравнениях [21]). Для любого $r \in \mathbb{R}^{N_c \times N_t - 1}$ и системы функций $\bar{U} \subset \bar{U}_{\text{meas}}$ выполняются тождества:

$$\begin{aligned} \bar{H}_{\bar{U}} (\bar{I} - \bar{A}(r)) &= m_{\bar{U}}[r, 0](\bar{r}^{(*)} - r) + q, \\ q &= (m_{\bar{U}}[r, \bar{r}^{(*)} - r] - m_{\bar{U}}[r, 0])(\bar{r}^{(*)} - r) + \bar{H}_{\bar{U}} \delta \bar{I}. \end{aligned}$$

Эти уравнения мы и будем решать в рамках численного алгоритма решения обратной задачи.

4. Алгоритм решения обратной задачи

В качестве системы проектирования \bar{U} временных рядов используем

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

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

Выбор Θ можно осуществлять на основе временного разрешения получаемых рядов, возможностей вычислительной системы и уровня шума. Таким образом, число элементов базиса возрастает как с увеличением числа измеряемых компонент, так и с увеличением их детализации. В этом случае $\Xi = \Theta |L_{\text{meas}}|$, где $|L_{\text{meas}}|$ — количество элементов L_{meas} . На основе элементов \bar{U} строится ансамбль решений сопряженных уравнений.

Пусть известно, частицы каких размеров выбрасывает источник. Обозначим индексы этих размеров частиц через L_{src} . Рассмотрим следующую операцию проектирования:

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

Определим для матрицы $C \in \mathbb{R}^{\Xi \times N_c(N_t - 1)}$ операцию

$$[CC^T]_{\Sigma}^+ = \sum_{l=1}^p \frac{U_l}{\sigma_l^2} \langle \cdot, U_l \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}}, \quad \sigma_1 / \sigma_p \leq \Sigma < \sigma_1 / \sigma_{p+1},$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^{\Xi}}$ — евклидово скалярное произведение в \mathbb{R}^{Ξ} , σ_l — сингулярные числа C , $\{U_l\}_{l=1}^{\text{rank}(C)}$ — ортонормированная система левых сингулярных векторов C . В дополнение к J определим целевой функционал для проекции невязки

$$J_{\bar{U}}(r) = \|\bar{H}_{\bar{U}} (\bar{I} - \bar{A}(r))\|_{\mathbb{R}^{\Xi}}^2.$$

На основе следствия 2 построим алгоритм типа Ньютона–Канторовича (алгоритм 1), который является модификацией алгоритма из работы [21]. В нем так же, как и в алгоритме Ньютона–Канторовича, используется обращение линейризованного оператора из операторной постановки обратной задачи, однако при этом также используется регуляризация на основе усеченного сингулярного разложения с постепенным уменьшением влияния регуляризации.

Зададимся начальным приближением r_0 , числом $\text{cond}_{\max} > 1$, описывающим верхнюю границу чисел обусловленности обрабатываемых в алгоритме матриц, приращением рассматриваемых чисел обусловленности $\Delta\Sigma > 1$, критерием стабилизации итераций $\varepsilon_{\text{stab}}$, и рассмотрим алгоритм 1.

Алгоритм 1 (Алгоритм типа Ньютона–Канторовича)

```

 $\Sigma \leftarrow 1$ 
 $k \leftarrow 0$ 
 $r^{(k)} \leftarrow r_0$ 
while  $\Sigma < \text{cond}_{\max}$  and  $J_{\bar{U}}(r^{(k)}) > \|\bar{H}_{\bar{U}}\delta\bar{I}\|_{\mathbb{R}^{\Xi}}^2$  do
  repeat
     $m^{(k)} \leftarrow$  матрица оператора  $m_{\bar{U}}[r^{(k)}, 0]$ 
     $\delta r^{(k)} \leftarrow \text{Pr}_{\text{src}}(m^{(k)})^T \left[ m^{(k)} (m^{(k)})^T \right]_{\Sigma}^+ \bar{H}_{\bar{U}} (\bar{I} - \bar{A}(r^{(k)}))$ 
     $\gamma \leftarrow 1$ 
     $r_{\text{test}}(\gamma) \leftarrow r^{(k)} + \gamma\delta r^{(k)}$ 
    while (not  $\|\bar{H}_{\bar{U}}\delta\bar{I}\|_{\mathbb{R}^{\Xi}}^2 < J_{\bar{U}}(r_{\text{test}}(\gamma)) < J_{\bar{U}}(r^{(k)})$ ) or  $J(r_{\text{test}}(\gamma)) > J(r^{(k)})$  do
       $\gamma \leftarrow \gamma/2$ 
    end while
     $k \leftarrow k + 1$ 
     $r^{(k)} \leftarrow r^{(k-1)} + \gamma\delta r^{(k-1)}$ 
  until  $\|r^{(k)} - r^{(k-1)}\| \leq \varepsilon_{\text{stab}} \|r^{(k-1)}\|$ 
   $\Sigma \leftarrow \Sigma\Delta\Sigma$ 
end while

```

В алгоритме 1 сингулярное разложение строится для матриц размера $\Xi \times \Xi$, где Ξ — размер ансамбля решений сопряженного уравнения, который является управляемым параметром. В отличие от алгоритма из [21], в данном случае внешние итерации ведутся не по количеству рассматриваемых сингулярных чисел и векторов, а по числу обусловленности, что лучше согласуется с оценкой точности решения систем линейных алгебраических уравнений.

Относительная простота переноса алгоритма из [21] и всех его последующих модификаций на различные модели обусловлена тем, что он реализован в рамках объектно-ориентированного подхода. При этом все содержательные вычисления выполняются в базовых классах, а конкретные особенности моделей (в данном случае операторы продукции–деструкции и соответствующие им операторы разделенных разностей) задаются в классах-потомках без необходимости повторного программирования алгоритма в каждом конкретном случае.

5. Численные эксперименты

В численных экспериментах выберем ядро уравнения (1) постоянным $k_{li} = 1$. Для интегро-дифференциального уравнения Смолуховского известны лишь несколько ана-

литических решений, в число которых входит аналитическое решение для постоянного ядра. Поэтому случай единичного ядра был выбран для проверки алгоритма в самых простых, но при этом уже содержательных, условиях. Матрица, описывающая ядро, является входным параметром соответствующей компьютерной программы. В будущем предполагается рассмотреть и другие ядра. Во всех последующих численных экспериментах сетки предполагаются равномерными.

Эксперимент 1. Для проверки алгоритма решения прямой задачи используем аналитическое решение интегро-дифференциального уравнения Смолуховского [6], спроектировав его в пространство сеточных функций:

$$\varphi_l(t^j) = \frac{1}{\left(1 + \frac{t^j}{2}\right)^2} \exp\left(-\frac{x_l}{1 + \frac{t^j}{2}}\right). \quad (16)$$

Рассмотрим сходимость приближенного решения ϕ к аналитическому при $N_c = 1000$, $T = 100$, $X = 100$ и: 1) $N_t = 10000$; 2) $N_t = 2500$; 3) $N_t = 1000$; 4) $N_t = 500$. Относительная ошибка, вычисленная по фробениусовой норме, представлена на рисунке 1. В представленном эксперименте алгоритм решения прямой задачи показывает первый порядок сходимости.

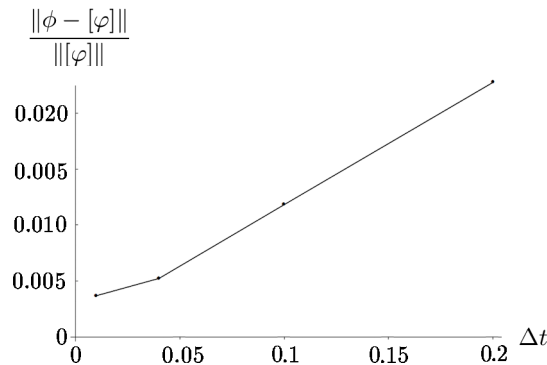


Рис. 1. Относительная ошибка решения прямой задачи при различных N_t ($\Delta t = T/N_t$)

Эксперимент 2. Далее численно изучим эффективность алгоритма решения обратной задачи. Пусть источники выбрасывают в атмосферу частицы из заданного диапазона размеров

$$r_l(t^j) = \begin{cases} 2, & l \in [20, 30], j \in \left[0, \frac{N_t}{3}\right] \cup \left[2\frac{N_t}{3}, N_t\right], \\ 1, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (17)$$

При постановке численного эксперимента вычислим решение прямой задачи на сетке ω_t . При решении обратной задачи значение источника неизвестно, но полагаем известной информацию о том, что выбросов частиц других размеров, кроме размеров L_{src} , нет. Временные ряды концентраций частиц ϕ_l с индексами $l \in L_{meas} = \{20 \leq l \leq 30\}$ доступны алгоритму решения обратной задачи в качестве данных измерений. Пусть $N_c = 100$, $N_t = 1000$, $\Theta = 60$. Начальное приближение r_0 во всех последующих экспериментах — нулевое. Временной ход интенсивности “точного” и восстановленного источников представлен на рис. 2а.

При решении обратной задачи в рассмотренных примерах видно, что разрабатываемый алгоритм достаточно хорошо восстанавливает разрывы функции источника. Возникающие в решении осцилляции увеличиваются на границах области. Мы считаем такое

поведение ожидаемым, так как, во-первых, решение обратной задачи строится из решений сопряженных уравнений, которые при $t = T$ равны нулю, тогда как сам источник в этих точках ненулевой. Во-вторых, значение функции источника в заданный момент времени оказывает влияние на значения функции состояния модели только в последующие моменты времени. Следовательно, по мере приближения конца интервала, количество доступной информации о заданном значении функции источника убывает и качество его восстановления должно ухудшаться. Этот недостаток можно искусственно восполнить, задав финальное значение источника, однако практического смысла это, скорее всего, не имеет.

Положим далее, что $N_c = 100$ и источник задается следующей функцией:

$$r_l(t^j) = \begin{cases} 2, & l = 25, j \in \left[0, \frac{N_t}{3}\right] \cup \left[2\frac{N_t}{3}, N_t\right], \\ 1, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (18)$$

Эксперимент 3. Если измерять значения концентраций функции состояния в области частиц с размером вдвое большей той, где действует источник, т. е. $L_{\text{meas}} = \{49 \leq l \leq 51\}$ при $T = 6$ и $N_t = 1000$, то восстановление источника возможно, однако результат хуже (рис. 2б), чем при измерении концентраций в области выбрасываемых частиц. Это связано с тем, что, к примеру, частицы размера $l - i$ слипаются с частицами размера i , образуя тем самым частицы размера l и их количество растет, но в то же время количество частиц размера $l - i$ и i убывает. Из-за такого слипания образуется “след” действия источника в области частиц больших размеров, который отображается с определенной периодичностью и постепенным убыванием концентрации частиц в этих областях. Определение источника по такому “следу” сложнее, чем при прямых наблюдениях в области действия источника. При измерении концентрации частиц в области размеров выбрасываемых частиц, восстановление источника получается лучше, чем при измерении в другой области.

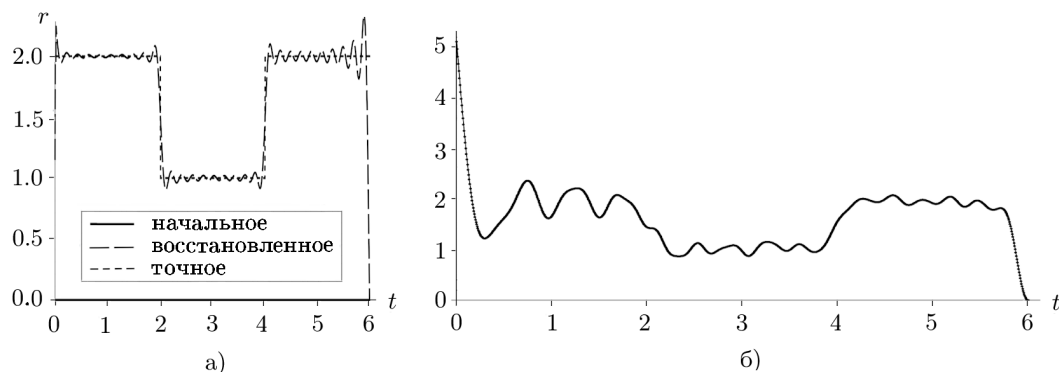


Рис. 2. “Точное” решение, восстановленное по данным $L_{\text{meas}} = \{20 \leq l \leq 30\}$ решение для источника (17) и начальное приближение $r^{(0)}$ (а). Результат восстановления источника (18) по данным $L_{\text{meas}} = \{49 \leq l \leq 51\}$ (б)

В следующих примерах, если не оговорено иное, даны измерения концентраций в области $L_{\text{meas}} = \{24 \leq l \leq 26\}$.

Эксперимент 4. При вычислениях алгоритма 1 и стандартного алгоритма сопряженных градиентов [27] было установлено, что при $N_t = 100$ градиентный алгоритм решает задачу за 1.301 секунды, а алгоритм 1 — за 2.223 секунды (рис. 3а), т. е. градиентный алгоритм работает быстрее, чем алгоритм 1, но получает более сглаженное решение.

Однако при большем количестве узлов ($N_t = 1000$) и при том же числе точек N_c алгоритм 1 решает задачу за 17.715 секунды и превосходит градиентный алгоритм по скорости (83.578 с) и по сходимости полученного решения к точному (рис. 3б) в части восстановления разрывов функции источника.

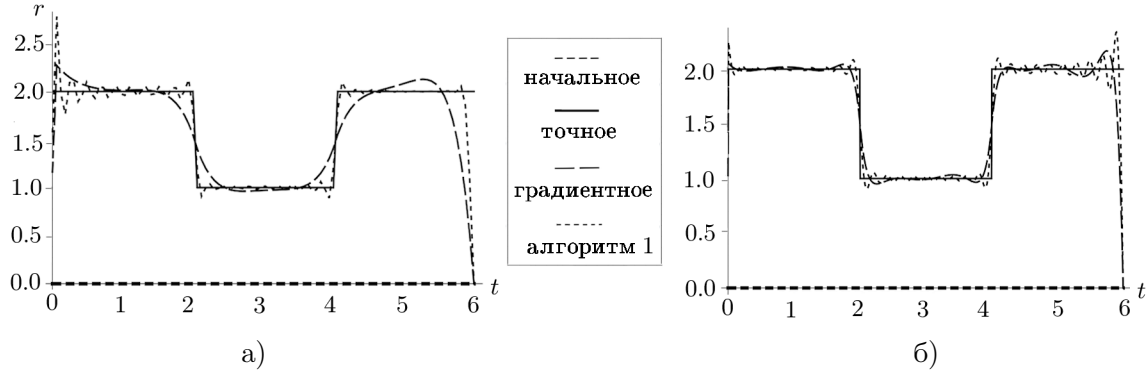


Рис. 3. Результаты восстановления источника (18) градиентным алгоритмом и алгоритмом 1 при $N_t = 100$ (а), $N_t = 1000$ (б), точного решения и начального приближения

Эксперимент 5. Для исследования устойчивости алгоритма добавим в данные измерений шум

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

где n — равномерно распределенная на отрезке $[-1, 1]$ случайная величина. На рис. 4а, 4б и 4в показаны результаты восстановления источников при $N_t = 1000$ и наложении шума с уровнями $\delta_n = 0.001, 0.01, 0.1$ соответственно. На рис. 4г представлены значения восстановленного источника, когда измерения проводятся в $L_{\text{meas}} = \{49 \leq l \leq 51\}$ (т. е. за пределами диапазона размеров выбрасываемых частиц), при уровне шума $\delta_n = 10^{-6}$. По мере убывания шума в данных точность восстановления увеличивается, что свидетельствует в пользу эффективности выбранного способа итеративной регуляризации в рассматриваемом алгоритме.

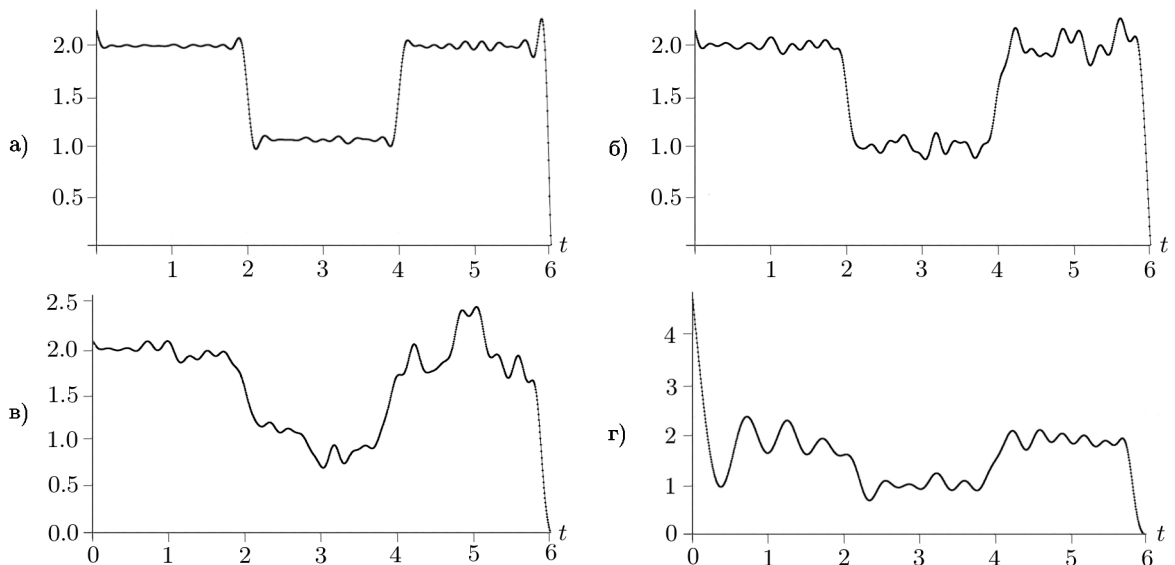


Рис. 4. Результаты восстановления источника (18) при $L_{\text{meas}} = \{24 \leq l \leq 26\}$ и различном уровне шума $\delta_n = 0.001$ (а), $\delta_n = 0.01$ (б), $\delta_n = 0.1$ (в) и при $L_{\text{meas}} = \{49 \leq l \leq 51\}$, $\delta_n = 10^{-6}$ (г)

6. Заключение

В работе приведен пример реализации алгоритма типа Ньютона–Канторовича с использованием ансамблей сопряженных функций для решения задачи идентификации источников в дискретизированном уравнении Смолуховского с данными типа временных рядов значений концентраций.

Научная новизна работы состоит в расширении области применения алгоритмов на основе ансамблей решений сопряженных уравнений к задаче идентификации источников в дискретизированном уравнении Смолуховского. Проведена серия стандартных численных экспериментов для оценки эффективности алгоритма решения обратных задач: проверена сходимость алгоритма решения прямой задачи, проведена оценка чувствительности к шуму в данных, проведено сравнение с широко используемыми при решении обратных задач стандартным оптимизационным алгоритмом, изучена чувствительность решения к составу данных измерений. Кроме того, построение оператора чувствительности открывает путь к исследованию обратной задачи методами функционального анализа.

Благодарности. Авторы благодарны Э.А. Пьяновой и Е.А. Цветовой за ценные советы по содержанию статьи.

Литература

1. **Pope C. Arden, Dockery Douglas W.** Health effects of fine particulate air pollution: lines that connect // J. of the Air & Waste Management Association. — 2006. — Vol. 56, iss. 6. — P. 709–742.
2. **Seinfeld J.H., Pandis S.N.** Atmospheric chemistry and physics // Air Pollution to Climate Change. 2nd edition. — John Wiley & Sons, 2006. — ISBN: 978-0-471-7218-8.
3. **Smoluchowski M.V.** Drei vortrage uber diffusion, brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen // Physik. Zeit. — 1916. — Vol. 17. — P. 557–585.
4. **Smoluchowski M.V.** Uber brownsche molekularbewegung unter einwirkung äußerer Kräfte und deren zusammenhang mit der verallgemeinerten diffusionsgleichung // Annalen der Physik. — 1916. — Vol. 353, № 24. — P. 1103–1112.
5. **Mueller Hans.** Zur allgemeinen theorie ser raschen koagulation // Kolloidchemische Beihefte. — 1928. — Vol. 27, № 6-12. — P. 223–250.
6. **Галкин В.А.** Уравнение Смолуховского. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.
7. **Алоян А.Е.** Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. — М.: Наука, 2008.
8. **Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtysnikov E.E.** A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // J. of Computational Physics. — 2015. — Vol. 282. — P. 23–32.
9. **Matveev S.A, Krapivsky P.L, Smirnov A.P., Tyrtysnikov E.E., Brilliantov N.V.** Oscillations in aggregation-shattering processes // Physical Review Letters. — 2017. — Vol. 119, № 26. — P. 1–10. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.260601.
10. **Агошков В.И.** Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. — М.: ИВМ РАН, 2003.
11. **Mirzaev Inom, Byrne Erin C., Bortz David.** An inverse problem for a class of conditional probability measure-dependent evolution equations // Inverse Problems. — 2016. — Vol. 32, № 9. — P. 095005.

12. **Марчук Г.И.** О постановке некоторых обратных задач // ДАН СССР. — 1964. — Т. 156, № 3. — С. 503–506.
13. **Марчук Г.И.** Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. — М: Наука, 1992.
14. **Issartel J.P.** Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2003. — Vol. 3, № 6. — P. 2111–2125.
15. **Issartel J.P.** Emergence of a tracer source from air concentration measurements, a new strategy for linear assimilation // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2005. — Vol. 5, № 1. — P. 249–273.
16. **Evensen Geir.** Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using monte carlo methods to forecast error // J. of Geophysical Research. — Vol. 99, № C5. — P. 10143.
17. **Agoshkov V.I., Dubovski P.B.** Solution of the reconstruction problem of a source function in the coagulation-fragmentation equation // Russ. J. of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2002. — Vol. 17, iss. 4. — P. 319–330.
18. **Bennett Andrew F.** Inverse Methods in Physical Oceanography (Cambridge Monographs on Mechanics). — Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
19. **Karchevsky A.L.** Reformulation of an inverse problem statement that reduces computational costs // Eurasian J. of Mathematical and Computer Applications. — 2013. — Vol. 1, № 2. — P. 4–20.
20. **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.
21. **Пененко А.В.** Метод Ньютона–Канторовича для решения обратных задач идентификации источников в моделях продукции–деструкции с данными типа временных рядов // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2019. — Т. 22, № 1. — С. 57–79.
22. **Le Dimet F.-X., Souopgui I., Titaud O., et al.** Toward the assimilation of images // Nonlinear Processes in Geophysics. — 2015. — Vol. 22, № 1. — P. 15–32.
23. **Пененко А.В.** О решении обратной коэффициентной задачи теплопроводности методом проекции градиента // Сибирские электронные математические известия. Тр. Первой международной молодежной школы-конференции “Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач”. Часть I. — 2010. — Т. 23. — С. 178–198.
24. **Пененко А.В., Николаев С.В., Голушко С.К. и др.** Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии // Мат. биол. и биоинф. — 2016. — Т. 11, № 2. — С. 426–444.
25. **Пененко А.В., Сороковой А.А., Сороковая К.Е.** Численная модель трансформации биоаэрозолей в атмосфере // Оптика атмосферы и океана. — 2016. — Т. 29, № 6. — С. 462–466.
26. **Hesstvedt Eigil, Hov Oystein, Isaksen Ivar S.A.** Quasi-steady-state approximations in air pollution modeling: Comparison of two numerical schemes for oxidant prediction // Int. J. of Chemical Kinetics. — 1978. — Vol. 10, № 9. — P. 971–994.
27. GNU Scientific Library Reference Manual Edition 2.2.1, for GSL Version 2.2.1, 2009. — Access mode: https://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/index_old.html.

*Поступила в редакцию 12 декабря 2018 г.
После исправления 22 марта 2019 г.
Принята к печати 19 декабря 2019 г.*

Литература в транслитерации

1. **Pope C. Arden, Dockery Douglas W.** Health effects of fine particulate air pollution: lines that connect // J. of the Air & Waste Management Association. — 2006. — Vol. 56, iss. 6. — P. 709–742.
2. **Seinfeld J.H., Pandis S.N.** Atmospheric chemistry and physics // Air Pollution to Climate Change. 2nd edition. — John Wiley & Sons, 2006. — ISBN: 978-0-471-7218-8.
3. **Smoluchowski M.V.** Drei vortrage uber diffusion, brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen // Physik. Zeit. — 1916. — Vol. 17. — P. 557–585.
4. **Smoluchowski M.V.** Uber brownsche molekularbewegung unter einwirkung äußerer Kräfte und deren zusammenhang mit der verallgemeinerten diffusionsgleichung // Annalten der Physik. — 1916. — Vol. 353, № 24. — P. 1103–1112.
5. **Mueller Hans.** Zur allgemeinen theorie ser raschen koagulation // Kolloidchemische Beihefte. — 1928. — Vol. 27, № 6-12. — P. 223–250.
6. **Galkin V.A.** Uravnenie Smolukhovskogo. — M.: FIZMATLIT, 2001.
7. **Aloyan A.E.** Modelirovanie dinamiki i kinetiki gazovykh primesei i aerolei v atmosfere. — M.: Nauka, 2008.
8. **Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtysnikov E.E.** A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // J. of Computational Physics. — 2015. — Vol. 282. — P. 23–32.
9. **Matveev S.A., Krapivsky P.L, Smirnov A.P., Tyrtysnikov E.E., Brilliantov N.V.** Oscillations in aggregation-shattering processes // Physical Review Letters. — 2017. — Vol. 119, № 26. — P. 1–10. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.260601.
10. **Agoshkov V.I.** Metody optimal'nogo upravleniya i sopryazhennykh uravnenii v zadachakh matematicheskoi fiziki. — M.: IVM RAN, 2003.
11. **Mirzaev Inom, Byrne Erin C., Bortz David.** An inverse problem for a class of conditional probability measure-dependent evolution equations // Inverse Problems. — 2016. — Vol. 32, № 9. — P. 095005.
12. **Marchuk G.I.** O postanovke nekotorykh obratnykh zadach // DAN SSSR. — 1964. — T. 156, № 3. — S. 503–506.
13. **Marchuk G.I.** Sopryazhennyye uravneniya i analiz slozhnykh sistem. — M: Nauka, 1992.
14. **Issartel J.P.** Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2003. — Vol. 3, № 6. — P. 2111–2125.
15. **Issartel J.P.** Emergence of a tracer source from air concentration measurements, a new strategy for linear assimilation // Atmospheric Chemistry and Physics. — 2005. — Vol. 5, № 1. — P. 249–273.
16. **Evensen Geir.** Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using monte carlo methods to forecast error // J. of Geophysical Research. — Vol. 99, № C5. — P. 10143.
17. **Agoshkov V.I., Dubovski P.B.** Solution of the reconstruction problem of a source function in the coagulation-fragmentation equation // Russ. J. of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2002. — Vol. 17, iss. 4. — P. 319–330.
18. **Bennett Andrew F.** Inverse Methods in Physical Oceanography (Cambridge Monographs on Mechanics). — Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
19. **Karchevsky A.L.** Reformulation of an inverse problem statement that reduces computational costs // Eurasian J. of Mathematical and Computer Applications. — 2013. — Vol. 1, № 2. — P. 4–20.
20. **Penenko A.V.** Soglasovannyye chislennyye skhemy dlya resheniya nelineynykh obratnykh zadach identifikatsii istochnikov gradientnymi algoritmi i metodami N'yutona–Kantorovicha // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2018. — T. 21, № 1. — S. 99–116.
21. **Penenko A.V.** Metod N'yutona–Kantorovicha dlya resheniya obratnykh zadach identifikatsii istochnikov v modelyakh produktsii–destruktsii s dannymi tipa vremennykh ryadov // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2019. — T. 22, № 1. — S. 57–79.

22. **Le Dimet F.-X., Souopgui I., Titaud O., et al.** Toward the assimilation of images // *Nonlinear Processes in Geophysics*. — 2015. — Vol. 22, № 1. — P. 15–32.
23. **Penenko A.V.** O reshenii obratnoi koeffitsientnoi zadachi teploprovodnosti metodom proektsii gradienta // *Sibirskie elektronnye matematicheskie izvestiya. Tr. Pervoi mezhdunarodnoi molodezhnoi shkoly-konferentsii “Teoriya i chislennye metody resheniya obratnykh i nekorrektnykh zadach”*. Chast’ I. — 2010. — T. 23. — S. 178–198.
24. **Penenko A.V., Nikolaev S.V., Golushko S.K. i dr.** Chislennye algoritmy identifikatsii koeffitsienta diffuzii v zadachakh tkanevoi inzhenerii // *Mat. biol. i bioinf.* — 2016. — T. 11, № 2. — S. 426–444.
25. **Penenko A.V., Sorokovoi A.A., Sorokovaya K.E.** Chislennaya model’ transformatsii bioaerozolei v atmosfere // *Optika atmosfery i okeana*. — 2016. — T. 29, № 6. — S. 462–466.
26. **Hesstvedt Eigil, Hov Oystein, Isaksen Ivar S.A.** Quasi-steady-state approximations in air pollution modeling: Comparison of two numerical schemes for oxidant prediction // *Int. J. of Chemical Kinetics*. — 1978. — Vol. 10, № 9. — P. 971–994.
27. GNU Scientific Library Reference Manual Edition 2.2.1, for GSL Version 2.2.1, 2009. — Access mode: https://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/index_old.html.

