

ВАРИАЦИОННАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА ПАССИВНОЙ ПРИМЕСИ И ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

С.В. Кочергин, В.С. Кочергин

Морской гидрофизический институт
НАН Украины
г. Севастополь, ул. Капитанская, 2
ko4ep@mail.ru

Рассматривается модель переноса пассивной примеси и алгоритм идентификации её параметров по данным измерений. На тестовых примерах показана работоспособность вариационного алгоритма усвоения и проведен анализ сходимости итерационного процесса поиска оптимального распределения параметров. Обсуждаются вопросы планирования экспериментов, префильтрации данных измерений и использования априорной информации.

При численном моделировании переноса пассивной примеси существует ряд параметров, которые известны нам весьма приближенно. Поэтому естественным образом встает задача нахождения и оценки этих параметров по данным измерений. Существуют различные подходы к решению этой проблемы. Один из них – вариационный подход [1-4], основанный на итерационном поиске минимума квадратичного функционала качества прогноза. Параметры, подлежащие определению, могут быть различными – это и начальные данные [5], коэффициенты модели [2], мощность источников загрязнения и т.д. В данной работе осуществлен поиск оптимальных, с точки зрения минимума функционала качества прогноза, значений коэффициента турбулентной диффузии в простейшей одномерной модели переноса. Кроме этого производится сравнение различных вариационных алгоритмов между собой и реализуется процедура выбора наиболее оптимального плана измерений. В качестве базовых вариационных алгоритмов рассмотрим алгоритм линеаризации и так называемый «adjoint» метод, основанный на решении сопряженной задачи.

Модель переноса. При численном моделировании распространения пассивной примеси приходится иметь дело с решениями, имеющими большие градиенты. В этих случаях применение разностных схем второго порядка аппроксимации приводит к

осцилляции решения в областях резких изменений поведения решения. Одним из возможных подходов решения такой задачи являются TVD (Total Variation Diminishing) схемы, первоначально предложенные Хартемом [6].

В области интегрирования D на интервале времени $[0, \bar{t}]$ в качестве модели переноса пассивной примеси рассмотрим простейшее одномерное уравнение:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + U \frac{\partial \varphi}{\partial x} = k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \quad \Gamma: \varphi = 0, \quad t = 0: \varphi = \varphi_0, \quad (1)$$

где $U = \text{const}$, $k = \text{const}$, Γ – граница области интегрирования.

Метод Линеаризации. Суть метода линеаризации заключается в замене нелинейной зависимости $\varphi(t, x, k)$ приближенной линейной, что достигается разложением в ряд Тейлора. В результате можно свести сложную задачу нелинейного оценивания к последовательности задач линейного оценивания. На каждом этапе такой последовательной процедуры удается получить достаточно простые формулы для линейного оценщика на основе метода наименьших квадратов. Достоинством этого метода также является то, что попутно можно получать информационную матрицу имеющую большое значение при решении задач планирования экспериментов.

Пусть нам известно истинное значение параметра $k_{ист}$. В этом случае разложим $\varphi(t, x, k)$ в ряд Тейлора и ограничимся членами первого порядка:

$$\varphi \cong \varphi|_{k_{ист}} + \frac{\partial \varphi}{\partial k} (k - k_{ист}) \quad (2)$$

Подставляя φ в функционал следующего вида:

$$I_0(\varphi) = (\varphi - \varphi_{изм}, \varphi - \varphi_{изм})_{L_1} \quad (3)$$

Запишем его вариацию:

$$\begin{aligned} \partial I_0(\varphi) = & (\varphi|_{k_{ист}} + \frac{\partial \varphi}{\partial k} (k - k_{ист}) - \\ & - \varphi_{изм}, \frac{\partial \varphi}{\partial k})_{L_1} \end{aligned} \quad (4)$$

Задача состоит в поиске минимума функционала (3), поэтому, исходя из условий его стационарности $\partial I_0(\varphi) = 0$ имеем:

$$\left(\frac{\varphi}{k_{\text{нст}}} + \frac{\partial \varphi}{\partial k} (k - k_{\text{нст}}) - \varphi_{\text{нст}}, \frac{\partial \varphi}{\partial k} \right)_{\text{л}} = 0 \quad (5)$$

Откуда получаем линейный оценитель для $k_{\text{нст}}$:

$$k_{\text{нст}} = k + \frac{\left(\varphi - \varphi_{\text{нст}}, \frac{\partial \varphi}{\partial k} \right)}{\left(\frac{\partial \varphi}{\partial k}, \frac{\partial \varphi}{\partial k} \right)} \quad (6)$$

где $\frac{\partial \varphi}{\partial k}$ - функция чувствительности является решением следующей задачи:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \varphi}{\partial k} + U \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial k} = k \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{\partial \varphi}{\partial k} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \\ \Gamma : \frac{\partial \varphi}{\partial k} = 0 \\ t = 0 : \frac{\partial \varphi}{\partial k} = 0 \end{cases} \quad (7)$$

«Adjoint» метод. В последние годы вариационный алгоритм идентификации параметров модели, основанный на решении сопряженной задачи и минимизации квадратичного функционала качества прогноза в зарубежной литературе [2-4] получил название «adjoint» метода. Ранее он достаточно успешно использовался при решении аналогичных задач динамики атмосферы и океана [1]. Суть метода состоит в том, что наряду с основной задачей решается сопряженная и это позволяет исследовать взаимосвязь вариации различных параметров модели, оценивать их вклад в общую вариацию системы.

Минимизация квадратичного функционала (3) осуществляется при условии, что φ является решением модели (1). Поэтому, поиск минимума (3) при ограничениях (1)

эквивалентно минимизации следующего функционала:

$$I(\varphi) = I_0(\varphi) + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + U \frac{\partial \varphi}{\partial x} - k \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}, \varphi^* \right) + (\varphi, \varphi^*)_{\text{л}} - (\varphi - \varphi_0, \varphi^*)_{\text{л}} \Big|_{t=0} \quad (8)$$

Следуя [3] выбираем множители Лагранжа как решение сопряженной задачи:

$$\begin{cases} -\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} - U \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} - k \frac{\partial^2 \varphi^*}{\partial x^2} = 0 \\ \Gamma : \varphi^* = 0 \\ t = \bar{t} : \varphi^* = \nabla I(\varphi) \end{cases} \quad (9)$$

Из условия стационарности функционала имеем:

$$\nabla k I(\varphi) = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \right)_{\text{л}} \quad (10)$$

Выражение (10) является градиентом функционала $I(\varphi)$ в пространстве параметров (в данном случае варьируется только $k = \text{const}$).

В случае восстановления начального поля:

$$\nabla \varphi_0 I(\varphi) = \varphi^* \Big|_{t=0} \quad (11)$$

С некоторым итерационным параметром τ необходимо осуществлять спуск в пространстве параметров в направлении этих градиентов:

$$\begin{cases} k_{n+1} = k_n + \tau \nabla_k I(\varphi) \\ \varphi_0^{n+1} = \varphi_0^n + \tau \nabla \varphi_0 I(\varphi) \end{cases} \quad (12)$$

Результаты численных экспериментов. Численные эксперименты проводились при следующих значениях параметров:

$$\begin{aligned} U &= 10 \text{ см/с}, \Delta x = 1.4 \cdot 10^6, \\ \Delta t &= 1.2 \cdot 10^3 \text{ сек}, A_M = 10^3 \text{ см}^2/\text{с}. \end{aligned}$$

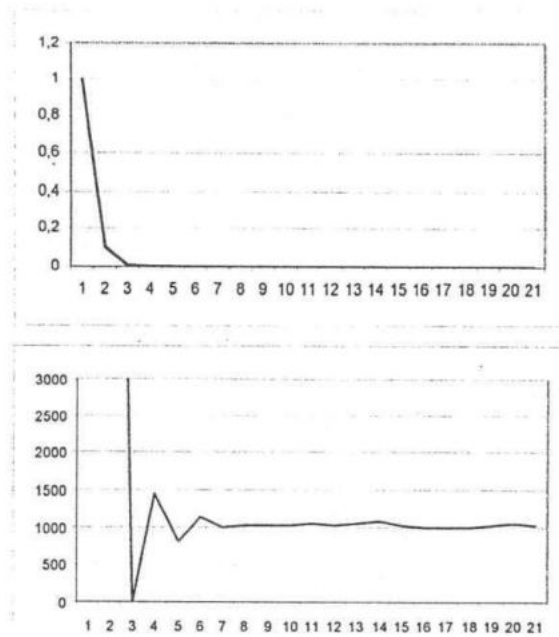


Рис. 1а,б — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций (а), установление истинного значения $Ж$ в процессе итераций(б).

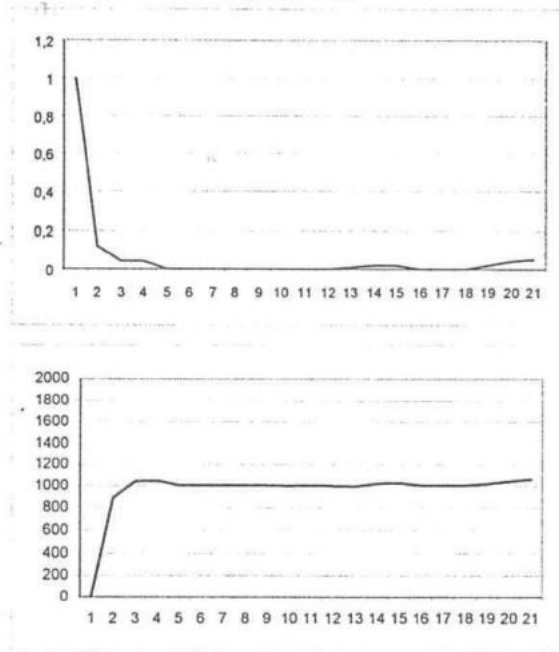


Рис. 2а,б — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций (а), установление истинного значения $Ж$ в процессе итераций(б).

Рисунок 1(а) характеризует падение отнормированного значения функционала качества прогноза в случае, когда $\varphi_{ист}$ генерировалось при $k_{ист} = 10^3$. Первоначальное значение k задавалось 10^5 . Рисунок

1(б) показывает, как в результате итераций восстанавливается правильное значение коэффициента при помощи метода линеаризации. Срок интегрирования модели 3 месяца. На рисунке 2 показаны эти же характеристики при первоначальном значении $k = 0$.

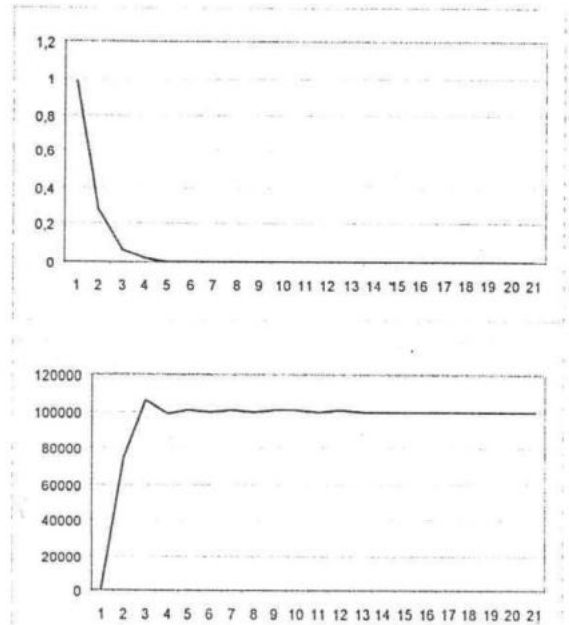


Рис. 3а,б — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций (а), установление истинного значения $Ж$ в процессе итераций(б).

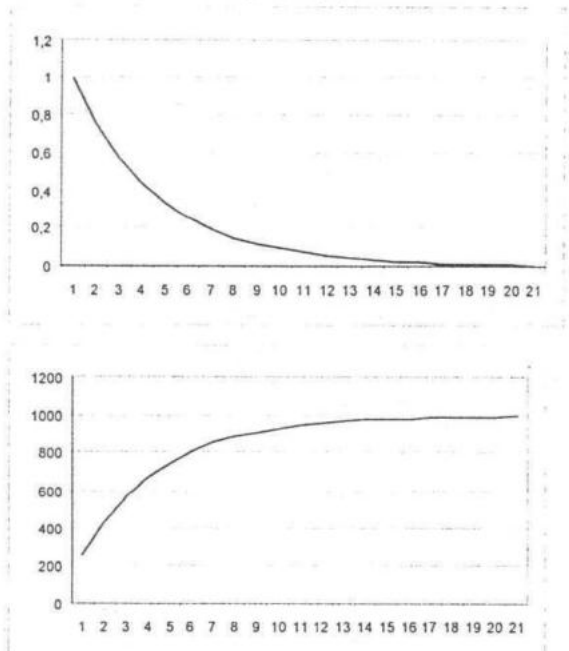


Рис. 4а,б — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций (а), установление истинного значения $Ж$ в процессе итераций(б).

Рисунок 3 соответствует расчету, когда данные генерировались при $k_{уст} = 10^5$. Из рисунков видно, что метод линеаризации дает достаточно надежные результаты по восстановлению «истинного» значения коэффициента турбулентной диффузии и обладает быстрой сходимостью.

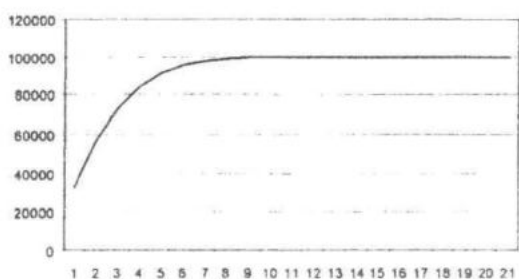
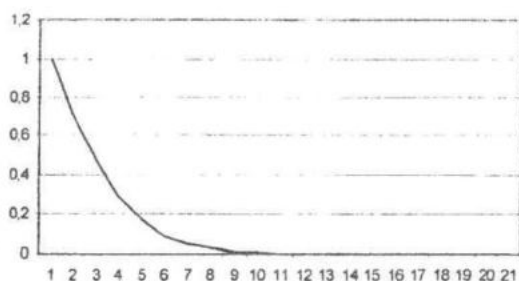


Рис. 5а,б — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций (а), установление истинного значения J в процессе итераций (б).

Рисунки 4 и 5 изображают процесс итерационного восстановления «истинного» значения $k = 10^3$ и $k = 10^5$ соответственно при реализации вариационного алгоритма основанного на решении сопряженной задачи. Скорость сходимости итерационного процесса несколько ниже, чем в случае реализации алгоритма линеаризации, но сам алгоритм обладает преимуществами, когда k не является константой. В этом случае решение сопряженной задачи в совокупности с решением основной позволяет оценивать градиент функционала качества прогноза в пространстве параметров. Спуск в направлении этого градиента осуществляется итерационно. Вопрос о выборе итерационного параметра является отдельной задачей.

Планирование экспериментов. В понятие оптимального плана можно вкладывать различный смысл — это и финансовая сто-

рона экспедиционных работ, удобство их проведения и т.д. В данном случае под оптимальным планом понимается план, дающий наилучшую обусловленность решаемой задачи идентификации параметров и улучшающий скорость сходимости итерационного процесса.

По определению планом эксперимента называют совокупность опорных точек, составляющих спектр и соответствующих им чисел повторных опытов. Чаще используют понятие нормированного плана:

$$\varepsilon_N = \left\{ \begin{matrix} t_1, t_2, \dots, t_N \\ p_1, p_2, \dots, p_N \end{matrix} \right\}, \quad (13)$$

где $0 \leq p_i \leq 1$, $\sum_{i=1}^N p_i = 1$

Информационная матрица имеет вид:

$$M(\varepsilon_N) = \sum_{i=1}^N F_i p_i F_i^T, \quad (14)$$

где F_i - матрица Якоби, которая строится с помощью решения задачи в вариациях, и выбирается в зависимости от того, какой параметр подлежит определению. Следовательно, для идентификации различных параметров численного моделирования оптимальные планы могут быть различными.

Суть алгоритмов поиска оптимального плана состоит в следующем:

- выбирается невырожденный начальный план;
- определяется область наибольшей информативности, где производятся дополнительные измерения;
- отыскиваются наименее информативные точки плана, которые отбрасываются.

Кроме этого можно сравнивать между собой несколько планов, априори заданных. Сравнение происходит по детерминанту матрицы (14), который характеризует обусловленность решаемой задачи идентификации параметров. В качестве примера, иллюстрирующего вышесказанное, рассмотрим задачу нахождения начального поля на момент времени $t = 0$ при наличии данных измерений $\varphi_{изм}$ на конечный момент времени \bar{t} . Решение поставленной задачи осуществляется при помощи решения сопряженной задачи и минимизации соответствующего функционала качества прогноза.

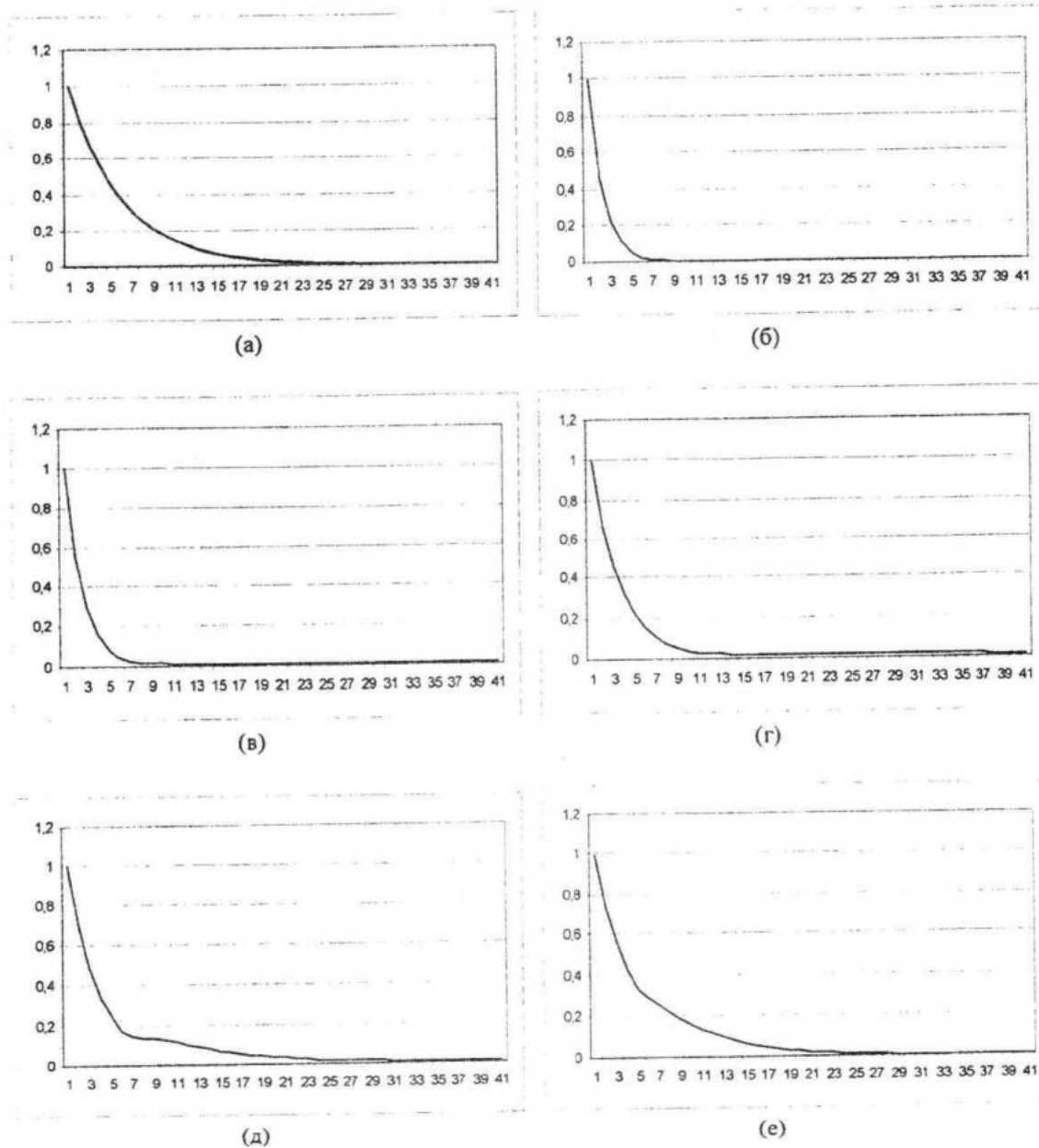


Рис. 6 — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций.

Рисунок 6 характеризует падение отнормированного значения функционала качества прогноза в зависимости от номера итерации в случае одного измерения в точке максимальной амплитуды решения (а). Рассмотрим случай трех измерений, одно из которых находится в самой информативной области решений (б). По мере перемещения крайних двух точек в область наименьшей информативности (в-е), итерационный процесс сходимости замедляется.

В следующем численном эксперименте осуществлен поиск оптимального плана в

процессе итерационного восстановления начального распределения поля концентраций. Первоначально было взято 10 опорных точек плана равномерно распределенных в области интегрирования. Пунктирная линия на рисунке 7 характеризует падение соответствующего функционала. Далее, в процессе усвоения данных измерений опорные точки плана перемещаются в область наибольшей информативности (сплошная линия), что приводит к улучшению сходимости итерационного процесса.

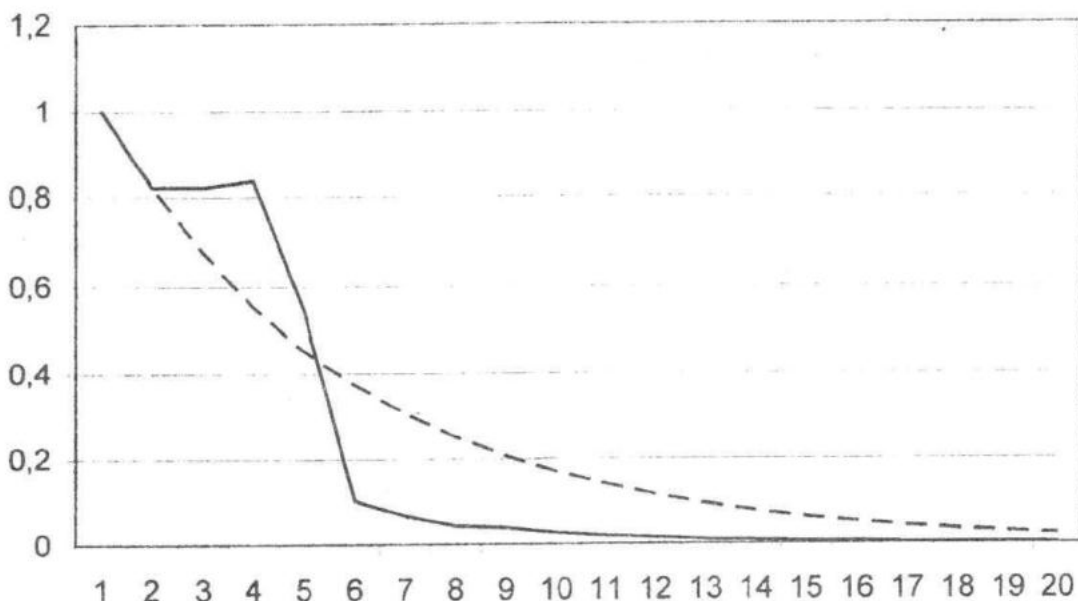


Рис. 7 — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций.

Использование априорной информации. При решении подобного класса задач идентификации параметров численного моделирования, дополнительная информация о поведении решения и о дисперсиях ошибок может оказать решающее воздействие на весь итерационный процесс поиска оптимального распределения параметров модели. Например, при решении задачи восстановления начального поля концентрации в модели переноса пассивной примеси важно учитывать то, что значения концентрации положительны. Кроме этого весомой может оказаться информация о возможных максимальных значениях концентрации, о дисперсиях ошибок проведенных измерений. В случае учета условия положительности решения, процесс итерационного поиска φ_0 несколько ускоряется, улучшается сама структура восстановленного φ_0 .

Согласование данных измерений с численной моделью переноса пассивной примеси. В процессе развития методов усвоения океанологической информации неоднократно указывалось на важность префилтрации данных измерений [7]. Проведенный нами численный эксперимент наглядно показывает на эту необходимость. Задача состоит в необходимости восстановления на-

чального профиля φ_0 в результате усвоения данных $\varphi_{изм}$. В случае, когда данные измерений генерируются при том же значении $ж$, которое используется в модели, восстановление происходит достаточно хорошо. Рисунок 8 показывает расчет, в котором данные генерировались при $ж = 10^3$, а усвоение производилось при $ж = 10^3$, $ж = 10^6$ соответственно. На рисунке 8(а) показана сходимость итерационного процесса при различных значениях $ж$. На рисунке 8(б) изображено восстановленное начальное поле при различных значениях $ж$. На рисунке 9 изображены результаты расчетов в случае генерации $\varphi_{изм}$ при $ж = 10^6$. Усвоение проводилось при следующих значениях параметров: $ж = 10^3$, $ж = 10^6$. Из приведенных результатов видно, что ассимиляция более сглаженной информации не приводит к ухудшению сходимости итерационного процесса. Максимум значений в идентифицируемом начальном поле может оказаться меньше истинного (это значение равно единице). Интересен другой случай, когда модель не описывает той функции, которая присутствует в данных измерений (рисунок 8). Мы не только не получаем истинного значения максимума, но и с увели-

чением \mathcal{J} , используемого в модели, постепенно теряем сходимость итерационного процесса. Имеющаяся в данных информация оказывается «шумом» для нашей модели. Для улучшения сходимости необходимо идентифицировать \mathcal{J} одним из выше описанных способов.

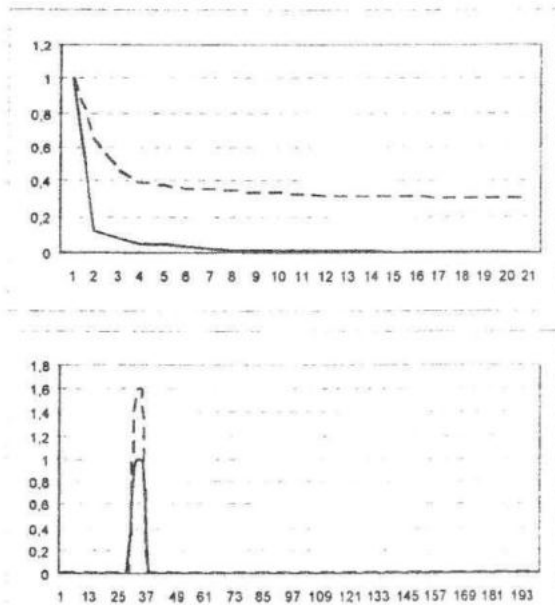


Рис. 8 — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций (а) и восстановленное начальное поле (б).

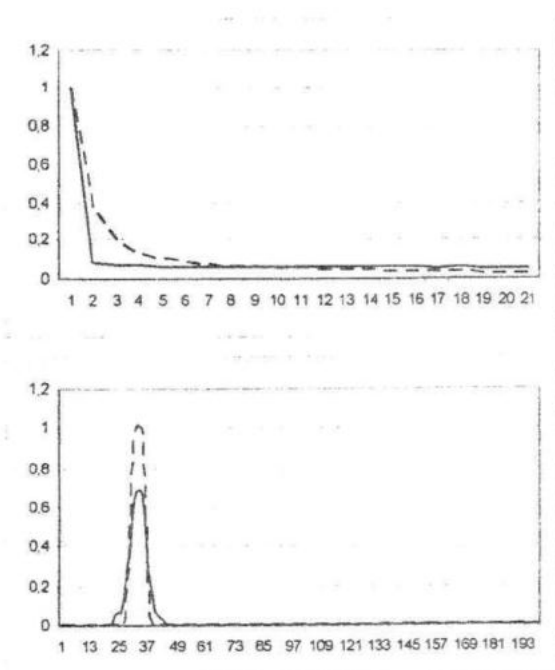


Рис. 9 — Падение отнормированного значения функционала I/I_0 в процессе итераций (а) и восстановленное начальное поле (б).

В целом рассматриваемые вариационные алгоритмы дают надежные результаты при восстановлении начальных полей и коэффициентов модели. Проведенные численные эксперименты показывают, что вычислительные свойства алгоритмов, решения обратных задач могут быть в значительной степени улучшены за счет выбора оптимальной схемы измерений. Реализация оптимального плана приводит к уменьшению необходимого количества итераций для достижения заданной точности определения идентифицируемого параметра. Использование дополнительной информации дает улучшение сходимости итерационного процесса и существенно корректирует поведение найденного решения исследуемой задачи в соответствии с априорной информацией. Используемая модель должна быть согласована с данными измерений или наоборот данные могут быть префильтрованы в соответствии с используемой численной моделью. Процесс сходимости итерационного процесса может служить показателем такой согласованности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. — Л.: Гидрометеоздат, 1981. — 352 с.
2. Yu, L., and J.J.O'Brien, 1991: Variational estimation of the wind stress drag coefficient and the oceanic eddy viscosity profile. *J.Phys.Oceanogr.*, 21 — P. 709-719.
3. Le Dimet, F.-X., and O.Talagrand Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations. Theoretical aspects. *Tellus, ser.A.*, 38A, 1986. — P. 97-110.
4. Yu, L., and P.Malanotte-Rezzoli, Inverse modeling of seasonal variations in the North Atlantic Ocean, *J.Phys.Oceanogr.*, 28, 1998. — P. 902
5. Еремеев В.Н., Кочергин В.П., Кочергин С.В., Скляр С.Н., Математическое моделирование гидродинамики глубоководных бассейнов. — Севастополь: «ЭКОВИ — Гидрофизика», 2002. — 238 с.
6. Harten A., High resolution schemes for hyperbolic conservation laws, I. *Comput. Phys.* — 1983. — P. 353-393.
7. Тимченко И.Е., Динамико-стохастические модели состояния океана. — Киев, Наукова Думка, 1981. — 178 с.