Система обратного моделирования IMDAF и её реализация

(по материалам докторской диссертации)

Пененко А.В.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН

Новосибирский государственный университет

Новосибирск, 2019

Акутальность

•Прогресс в параллельных вычислительных технологиях: требуются алгоритмы, естественно отображающиеся на параллельные архитектуры (ансамблевые алгоритмы, методы расщепления, декомпозиции и т.д.)

•Прогресс в методах решения нелинейных некорректных уравнений (различные методы регуляризации, SVD, сходимость и т.д.) и методах исследования

•Разнообразие приложений для задач обратного моделирования процессов адвекции-диффузии-реакции, в том числе

- •Исследование качества атмосферы (экологические приложения)
- •*Теория морфогенов (биология развития)*

•Единообразный подход к различным данным измерений включая данные типа изображений (большие объемы информации неизвестной ценности)

Цель: Эффективные численные алгоритмы для решения задач обратного моделирования процессов адвекции-диффузии-реакции с линейными операторами измерений.

Контакты с авторами работы: Пененко А.В. лаб ММГППС, a.penenko@yandex.ru

ИВМиМГ

Качество воздуха

СИБНИГМИ

ИНСТИТУТ ОПТИКИ АТМОСФЕРЫ им. В.Е. ЗУЕВА СО РАН

Table 1. Epidemiologic studies that have been used to estimate health effects used to develop the Environmental Benefits Mapping and Analysis Program—Community Edition used in this project.

END POINT	POLLUTANT	STUDY REFERENCE	AGE RANGE IN STUDY	RISK ESTIMATE FOUND IN THE STUDY (95% CONFIDENCE INTERVAL)
Premature mortality, all causes	$PM_{2.5}$	Krewski et al[30]	>29	RR = 1.06 (1.04–1.08) for 10 μg/m^3 increase in average $PM_{2.5}$
	O_3	Levy et al[31]	All ages	0.43% (0.29%–0.56%) change in mortality per 10 μg/m^3 change in O_3
Hospital admissions, all cardiovascular	$PM_{2.5}$	Peng et al[32]	>65	0.68% (0.26%–1.10%) change in daily admission for 10 μg/m^3 increase in average $PM_{2.5}$
Hospital admissions, all respiratory	$PM_{2.5}$	Zanobetti et al[33]	>65	2.07% (1.2%–2.95%) change in risk for 10 μg/m^3 increase in 2–d average $PM_{2.5}$
	O_3	Schwartz[34]	>65	RR = 1.07 (1.00–1.15) for 50 μg/m^3 increase in average daily O_3
Emergency room visits, asthma	$PM_{2.5}$	Mar et al[35]	All ages	RR = 1.04 (1.01–1.07) for 7 μg/m^3 in average daily $PM_{2.5}$
	O_3	Peel et al[36]	All ages	RR = 1.14 (1.09–1.19)
Acute respiratory symptoms	O_3	Ostro and Rothschild[37]	16–64	Effect estimate (β) = 0.00741 (0.00070)

Экономический эффект от изменения качества воздуха

Время пребывания на больничном и стоимость лечения

Stewart, D. R.; Saunders, E.; Perea, R. A.; Fitzgerald, R.; Campbell, D. E. & Stockwell, W. R. Linking Air Quality and Human Health Effects Models: An Application to the Los Angeles Air Basin // Environmental Health Insights, SAGE Publications, 2017 , 11 , 117863021773755

\+

Учет вторичных загрязнителей

Социальные эффекты

Мы за Экологию Красноярска! запись закреплена
8 апр 2017

Мы призываем вас на ЭкоМАЙДАН!

https://vk.com/ecoyarsk

Контакты с авторами работы: Пененко А.В. лаб ММГППС, a.penenko@yandex.ru

ИВМиМГ

Особенности математического моделирования в задачах охраны окружающей среды

- Нелинейность, разнообразие временных масштабов и процессов, высокая (до 10^{12}) размерность рассматриваемых моделей

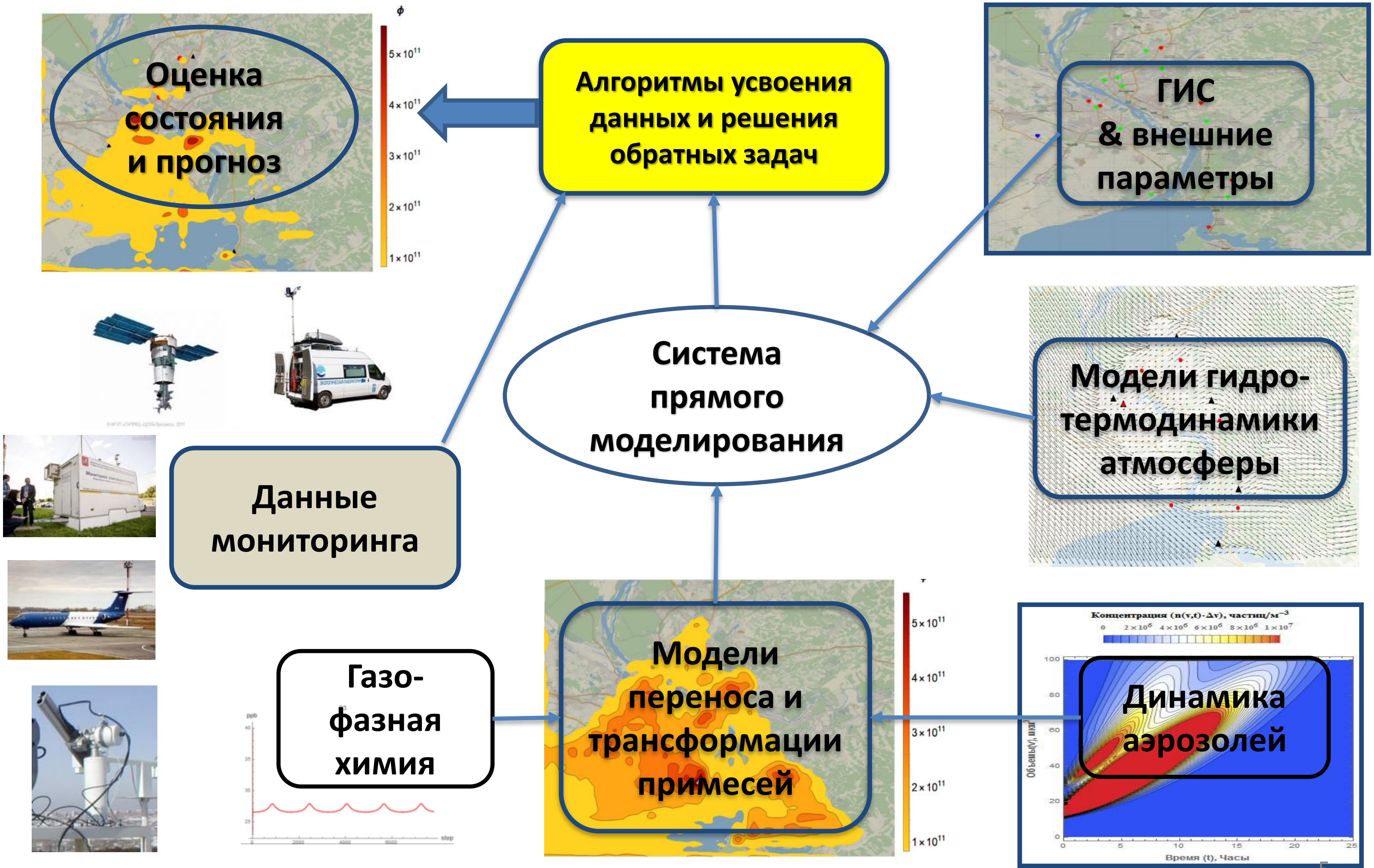
- Необходимость получать и уточнять прогноз по мере поступления данных измерений.

- Неизвестные источники выбросов, начальные и краевые условия, скорости трансформаций и другие параметры моделей, структура моделей.
- Небольшое количество доступных данных измерений

Контакты с авторами работы: Пененко А.В. лаб ММГППС, a.penenko@yandex.ru

ИВМиМГ

IMDAF.City: Система моделирования химического состава атмосферы с усвоением данных мониторинга



Контакты с авторами работы: Пененко А.В. лаб ММГППС, a.penenko@yandex.ru

ИВМиМГ

Иерархия задач (оценка качества воздуха) и вычислительная сложность

Вычислительная сложность

IMDAF

- Система обратного моделирования и усвоения данных ИВМиМГ СО РАН

ICM&MG Inverse Modeling and Data Assimilation Framework

Задачи усвоения данных

- Требуется строить прогноз в «реальном времени», уточняя параметры модели на основе поступающих данных измерений. Требует решения последовательности связанных обратных задач с различными наборами данными измерений. Решение предыдущих как априорная информация для следующих.

Обратные задачи

- Требуется найти неизвестную функцию состояния или неизвестные параметры по дополнительной информации. Может потребовать решения последовательности задач управления.

Задачи управления

- Требуется уточнить параметры моделей, чтобы приблизить модельные расчеты к данным измерений. Требует решения последовательности прямых задач с различными параметрами моделей.

Прямые/сопряженные задачи (оценка чувствительности)

- Требуется смоделировать и исследовать распределение концентраций химических веществ при заданных параметрах моделей.

Необходимо гибкое управление сложностью подзадач

Контакты с авторами работы: Пененко А.В. лаб ММГППС, a.penenko@yandex.ru

Модель адвекции-диффузии-реакции

ИВМиМГ

Область $\Omega_T = \Omega \times [0, T]$ Ω Прямоугольная в 0D, 1D, 2D, 3D

$$\frac{\partial \varphi_l}{\partial t} - \underbrace{\nabla \cdot \left(\mathrm{diag}\left(\mu_l \right) \nabla \varphi_l - \mathbf{u} \varphi_l \right)}_{\text{адвекция-диффузия}} + \underbrace{P_l(t, \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{y}) \varphi_l = \Pi_l(t, \boldsymbol{\varphi}, \mathbf{y})}_{\text{продукция-деструкция}} + f_l + r_l,$$

Шкала моделей: 0D, 1D, 2D, 3D $l = 1, \ldots, N_c$ - количество веществ

$$\begin{cases} \mathbf{n} \cdot \left(\mathrm{diag}\left(\mu_l \right) \nabla \varphi_l \right) + \beta_l \varphi_l = \alpha_l^R, & (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{out} \subset \partial\Omega \times (0, T], \\ \varphi_l = \alpha_l^D, & (\mathbf{x}, t) \in \Gamma_{in} \subset \partial\Omega \times (0, T], \end{cases}$$

$$\varphi_l = \varphi_l^0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, t = 0,$$

Оператор прямой задачи

$$\varphi : \begin{cases} Q \to \Phi \\ \{\mathbf{r}, \mu\} \mapsto \boldsymbol{\varphi} \end{cases},$$

Линейный оператор измерений

- Контактные
- Изображения
- Вертикальные профили

$Span U_{mes}$

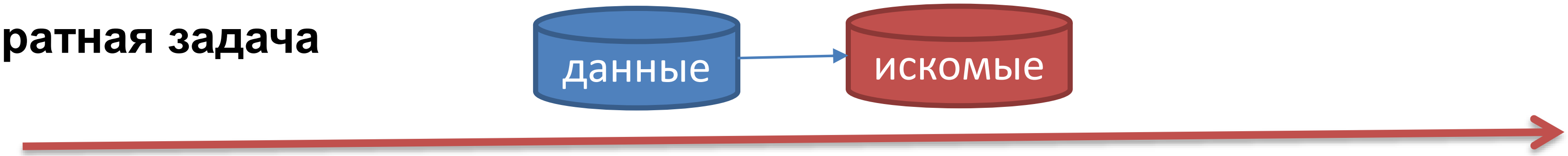
Обратная задача

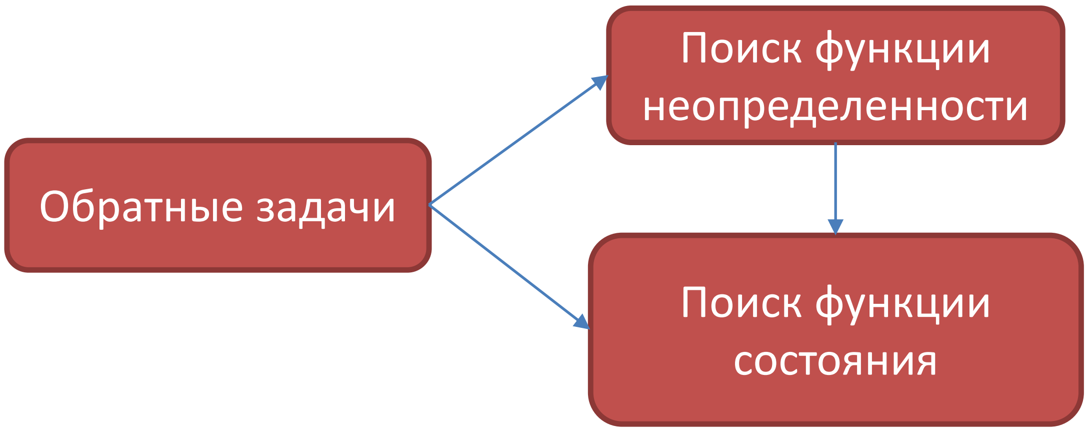
$$\mathbf{I} = \Pr_{U_{mes}} \boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(*)}, \mu^{(*)}] + \delta \mathbf{I},$$

Дано Найти Шум

Постановка задачи усвоения данных

Обратная задача

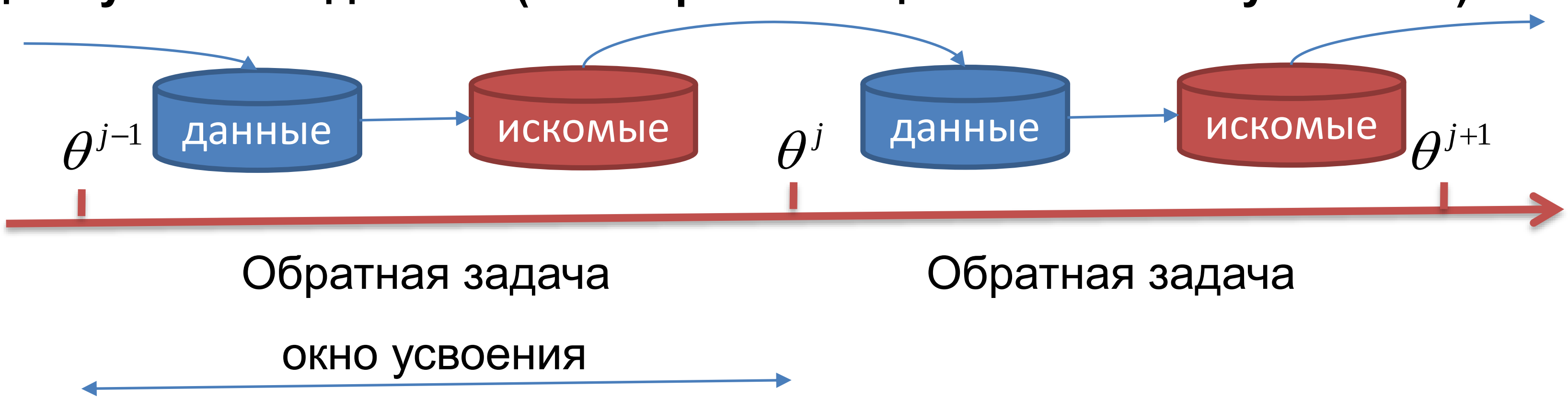




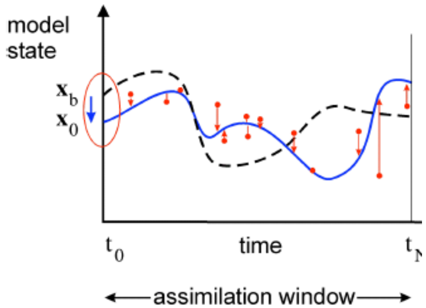
Задача идентификации источника, коэффициента, «с обратным временем»,…

Задача продолжения с «точек» измерения на всю область

Задача усвоения данных (с непересекающимися окнами усвоения)



Алгоритмы усвоения данных



Обзоры [Sandu,Chai,2011], [Bocquet et. al. 2014], [Carrassi,2018]

Алгоритмы усвоения данных

- **Детерминированные**
  - **Nudging**
  - **Вариационные**
    ([Sasaki,1955]), [Penenko, Obraztsov, 1976], [Dimet, Talagrand, 1986], [Talagrand,Courtier,1987]
    - **3DVar**
      ОЗ обращения оператора измерений (продолжения с постов мониторинга) на одном шаге по времени дискретной модели, решаемая вариационным методом. Модель входит в стабилизатор.
    - **«3.5DVar»**
      ОЗ идентификации источника на одном шаге по времени дискретной модели
      - **Динамическая Регуляризация [Осипов, 1999]**
      - **«Неявный» 3DVar**
    - **4DVar**
      - **Сильные ограничения**
        ОЗ о поиске начальных данных, решаемая вариационным методом (метеорология)
      - **Слабые ограничения**
        ОЗ о поиске начальных данных и источника, решаемая вариационным методом (в химии атмосферы: [Fisher, Lary, 1995], [Elbern, Schmidt, 1999],[Fisher et al. 2005], [Elbern et al. 2007])
  - **4DIP**
- **Стохастические**
- **Гибридные**

$$J(\varphi,r)=\left\|H\varphi-I\right\|^2+\alpha\left\|r\right\|^2\to\min$$

На ограничениях модели

Задачи оценки чувствительности

Тождество типа Лагранжа (соотношение чувствительности)

$$\langle \mathbf{h}, \delta\boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Phi} = \langle \boldsymbol{\delta}\mathbf{r}, \boxed{\Psi[\mathbf{h}]} \rangle_R + \langle \delta\mu, \boxed{\nabla\boldsymbol{\varphi}^{(2)}\nabla\Psi[\mathbf{h}]} \rangle_\mu$$

$$\delta\boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\varphi}^{(2)} - \boldsymbol{\varphi}^{(1)}$$

$$\boldsymbol{\varphi}^{(m)} = \boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(m)}, \mu^{(m)}]$$

Функции чувствительности

Сопряженная задача Дано $\mathbf{h}, \boldsymbol{\varphi}^{(m)}, \boldsymbol{\mu}^{(m)}, m = 1, 2,$ найти : $\boldsymbol{\Psi}$

$$-\frac{\partial \Psi_l}{\partial t} - \mathbf{u}\cdot\nabla\Psi_l - \nabla\cdot(diag(\boldsymbol{\mu}^{(1)})\nabla\Psi_l) + (G(t, \boldsymbol{\varphi}^{(2)}, \boldsymbol{\varphi}^{(1)})\boldsymbol{\Psi})_l = h_l,$$

$$G(t, \boldsymbol{\varphi}^{(2)}, \boldsymbol{\varphi}^{(1)}) = diag\left(P\left(t, \boldsymbol{\varphi}^{(2)}\right)\right) +$$

$$\bar{\nabla} P\left(t, \boldsymbol{\varphi}^{(2)}, \boldsymbol{\varphi}^{(1)}\right)^* diag\left(\boldsymbol{\varphi}^{(1)}\right) - \bar{\nabla}\Pi\left(t, \boldsymbol{\varphi}^{(2)}, \boldsymbol{\varphi}^{(1)}\right)^*,$$

$\bar{\nabla}$ -оператор разделенных разностей

\+ краевые условия сопряженной задачи **TC:** $\boldsymbol{\Psi}(T) = 0,$

Линейные параметризации $\delta r = \sum_m \beta_m \delta r_m$ $\langle \mathbf{h}, \delta\boldsymbol{\varphi} \rangle_{\Phi} = \sum_m \beta_m \langle \delta r_m, \Psi[\mathbf{h}] \rangle_R$

Градиентные алгоритмы

(идентификация источников)

Задан целевой функционал

$$J(\mathbf{r}) = \sum_{l \in L_{mes}} \left\| \varphi_l[\mathbf{r}] - I_l \right\|^2_{L_2(\Omega_T)} \rho_l .$$

Если параметры достаточно гладкие, то

$$\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}] \Rightarrow \mathbf{h} = \left\{ \begin{cases} 2(\varphi_l[\mathbf{r}] - I_l), l \in L_{mes} \\ 0, l \notin L_{mes} \end{cases} \right\}_{l=1}^{N_c} \Rightarrow \nabla J(\mathbf{r}) = \Psi[\varphi[\mathbf{r}], \varphi[\mathbf{r}], \mathbf{h}],$$

Например, алгоритм Полака-Рибьера, реализованный в GSL

$$\mathbf{r}^{(\mathbf{k}+1)} := \mathbf{r}^{(\mathbf{k})} - \alpha^{(k)} \mathbf{s}^{(\mathbf{k})},$$

$$\alpha^{(k)} = \arg\min_{\alpha > 0} J\left(\mathbf{r}^{(\mathbf{k})} - \alpha \mathbf{s}^{(\mathbf{k})}\right),$$

$$\mathbf{s}^{(\mathbf{k})} = \begin{cases} \mathbf{g}^{(\mathbf{k})} + \beta^{(k)} \mathbf{s}^{(\mathbf{k}\text{-}1)}, & k > 1 \\ \mathbf{g}^{(\mathbf{k})}, & k = 1 \end{cases},$$

$$\beta^{(k)} = \frac{\left\langle \mathbf{g}^{(\mathbf{k})}, \mathbf{g}^{(\mathbf{k})} - \mathbf{g}^{(\mathbf{k}\text{-}1)} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{g}^{(\mathbf{k}\text{-}1)}, \mathbf{g}^{(\mathbf{k}\text{-}1)} \right\rangle}, \quad \mathbf{g}^{(\mathbf{k})} = -\nabla_r J(\mathbf{r}^{(\mathbf{k})}).$$

Распараллеливание:

- **Схема расщепления для прямых и сопряжённых задач.**
- Ensemble approach in the special case when adjoint is independent on the direct problem solution [Karchevsky, A., Eurasian journal of mathematical and computer applications, 2013 , 1 , 4-20] (~2x speed-up)

IMDAF Classes

Управление памятью
Ввод-вывод
Сетки (пространства)
Предметная область: География, Биология

Алгоритмы с усвоением на одном шаге дискретной модели и отдельных стадиях схемы расщепления

Управление численным экспериментом (очередь задач)

Алгоритмы с произвольными длинами окон усвоения (в том числе на основе ансамблей сопряжённых функций)

Алгоритмы решения прямых задач

Внешние библиотеки:

- NetCDF (ввод-вывод)
- Eigen (SVD, алгебра)
- GSL (оптимизация)
- Boost

Алгоритмы с усвоением на одном шаге дискретной модели и отдельных стадиях схемы расщепления

Sequential Data Assimilation at the Splitting Stages (inverse problems ensemble)

ИВМиМГ

Splitting scheme on the interval $t^{j-1} \le t \le t^{j}$ ([Gordeziani,Meladze,1974]),

t^{j-1} t^{j}

$\phi\left(t^{j-1}\right)$

•Transport

$$\gamma_\xi \frac{\partial \phi_\xi}{\partial t} + L_\xi \phi_\xi = \gamma_\xi \left(f + r_\xi \right),$$

$$\{x,t\} \in [0, X_\xi] \times [t^{j-1}, t^{j}],$$

$$\phi_\xi\left(t^{j-1}\right) = \phi\left(t^{j-1}\right),$$

$$\xi \in \{x,y,z\}$$

•Transformation

$$\gamma_c \frac{\partial (\varphi_c)_l}{\partial t} + P_l(t,\vec{\varphi}_c)(\varphi_c)_l$$

$$= \Pi_l(t,\vec{\varphi}_c) + \gamma_c \left(f_l + (r_c)_l \right),$$

$$\phi_c\left(t^{j-1}\right) = \phi\left(t^{j-1}\right).$$

Variational DA WRT r_l

Direct Algorithm

Measurements I

Variational DA WRT r_l

Next step

$$\phi(t^{j}) = \sum_{\xi \in \{x,y,z,c\}} \gamma_\xi \phi_\xi(t^{j}).$$

$$\sum_{\xi \in \{x,y,z\}} \gamma_\xi + \gamma_c = 1.$$

Penenko, A. et al. Sequential Variational Data Assimilation Algorithms at the Splitting Stages of a Numerical Atmospheric Chemistry Model // Large-Scale Scientific Computing, Springer International Publishing, 2018 , 536-543

Penenko, A.; Mukatova, Z. S.; Penenko, V. V.; Gochakov, A. & Antokhin, P. N. Numerical study of the direct variational algorithm of data assimilation in urban conditions // Atmospheric and ocean optics, 2018 , 31 , 456-462

Direct variational data assimilation algorithms for transport processes

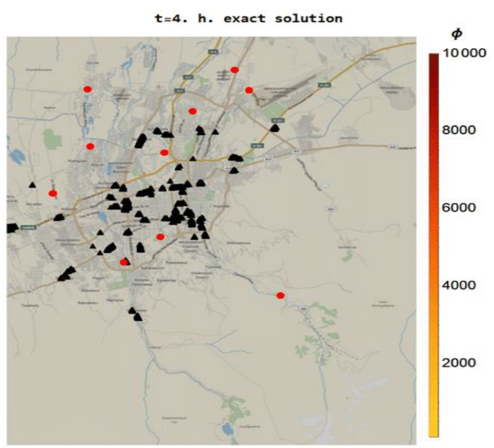
$$J(\phi^j, r^j) = \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{\phi_i^j - I_i^j}{\sigma_i} \right)^2 M_i^j + \alpha \sum_{i=0}^{N} \left(r_i^j \right)^2 + \beta \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{r_{i+1}^j - r_i^j}{\Delta x} \right)^2 \to \min$$

WRT constraints: $-L_i \phi_{i-1}^j + C_i \phi_i^j - R_i \phi_{i+1}^j = \phi_i^{j-1} + \tau f_i^j + \tau r_i^j, \quad i = 1, \dots, N$

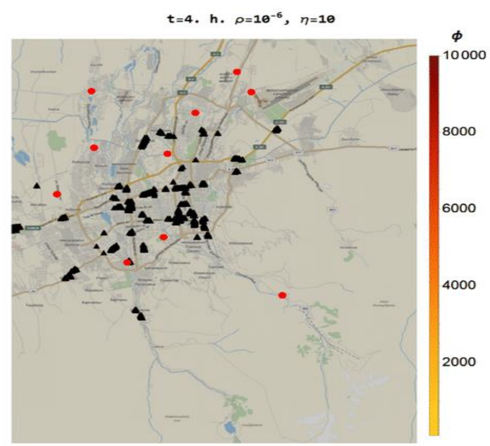
Three-diagonal matrix system (with 2x2 and 3x3 matrices)

$$-\tilde{R}_i \Phi_{i+1}^j + \tilde{C}_i \Phi_i^j - \tilde{L}_i \Phi_{i-1}^j = F_i^j, \quad \Phi_i^j = \begin{pmatrix} \phi_i^j \\ \phi_i^{*j} \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, N,$$

Can be solved with the direct algorithm



(a)



(б)

Penenko, A. V.; Penenko, V. V. & Tsvetova, E. A. Sequential data assimilation algorithms for air quality monitoring models based on a weak-constraint variational principle // Numerical Analysis and Applications, Pleiades Publishing Ltd, 2016 , 9 , 312-325

Penenko, A.V.; Khassenova, Z.T.; Penenko, V.V. & Pyanova, E.A. Numerical study of a direct variational data assimilation algorithm in Almaty city conditions // Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications, L. N. Gumilyov Eurasian National University, 2019 , 7 , 53-64

Variational data assimilation on the transformation stage

Direct problem

$$\frac{d\varphi_l}{dt} = -P_l(t,\vec{\varphi})\varphi_l + \Pi_l(t,\vec{\varphi}) + r_l, \quad l = 1,\dots,N_c$$

Discrete-analytical scheme of the 1st order

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

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

Adjoint problem

$$\vec{\psi}^{\,j-1} = \left(\mathbf{W}^j\right)^* \vec{\psi}^{\,j} + h^j, j = 1,\dots,\bar{N}_t - 1, \quad \psi^{\bar{N}_t - 1} = h^{\bar{N}_t},$$

$$\mathbf{W}^j = \operatorname*{diag}_{l=1,\dots,N_c} L\left(P_l\left(t^j,\vec{\phi}^j\right)\right) + \left\{S_l\left(t^j,\vec{\phi}^j,\vec{r}\right)\right\}_{l=1}^{N_c},$$

$$S_l\left(t,\vec{\varphi},\mathbf{r}\right) = G\left(P_l(t,\vec{\varphi})\right)\nabla\Pi_l\left(t,\vec{\varphi}\right) +$$
$$\left(\phi_l L'\left(P_l(t,\vec{\varphi})\right) + G'\left(P_l(t,\vec{\varphi})\right)(\Pi_l(t,\vec{\varphi}) + r_l)\right)\nabla P_l\left(t,\vec{\varphi}\right),$$

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

Lagrange type identity

Optimization problem

$$J\left(\vec{r}\right) = \alpha\sum_{l=1}^{N_c}\left(\phi_l^{\bar{N}_t} - I_l\right)^2 M_l + \sum_{l=1}^{N_c} R_l\left(r_l\right)^2 \to \min$$

$$l = 1,\dots,N_c, \quad j = 1,\dots,\bar{N}_t.$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r}) = 2\alpha\sum_{j=1}^{\bar{N}_t - 1}\left(F^j\right)^*\vec{\psi}^j + 2\operatorname*{diag}_{l=1,\dots,N_c}\left(R_l\right)\vec{\mathbf{r}},$$

$$F^j = \operatorname*{diag}_{l=1,\dots,N_c}\left(g\left(P_l\left(t^j,\vec{\phi}^j\right)\right)\right),$$

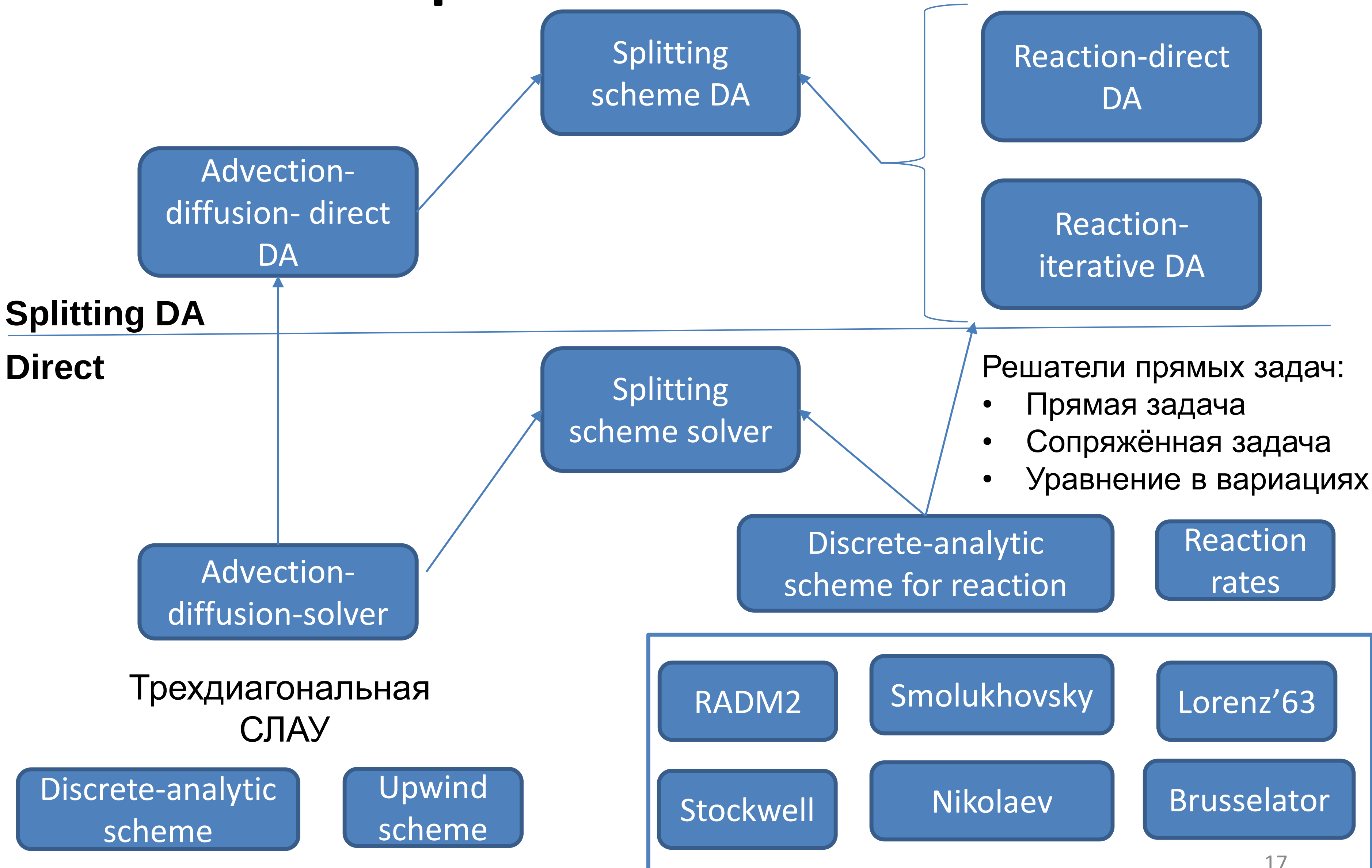
$$\vec{\psi} = \vec{\psi}(h), \qquad h = 2M_l\left(\phi_l^{\tilde{N}_t} - I_l\right),$$

A priori data inclusion: gradient projection method or weights in the stabilizer

Penenko, A. et al. Sequential Variational Data Assimilation Algorithms at the Splitting Stages of a Numerical Atmospheric Chemistry Model // Large-Scale Scientific Computing, Springer International Publishing, 2018 , 536-543

Penenko, A. Consistent numerical schemes for solving nonlinear inverse source problems with the gradient-type algorithms and the Newton-Kantorovich methods // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci., Pleiades Publishing Ltd, 2018 , 21 , 83-99.

IMDAF Direct & Splitting DA problem solvers



Разработанные алгоритмы вариационного усвоения данных

ИВМиМГ

Усвоение с единичным окном на отдельных стадиях схемы расщепления

Прямые алгоритмы (без итераций)

Многомерная модель адвекции-диффузии с усвоением

Многомерная модель адвекции-диффузии-реакции с усвоением на стадии переноса

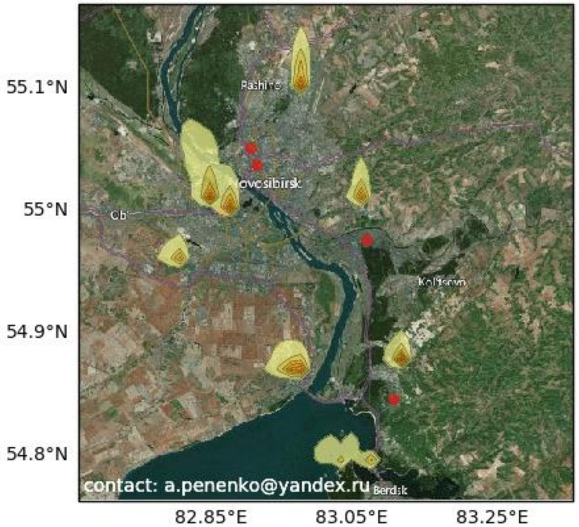
Многомерная модель адвекции-диффузии-реакции с усвоением прямыми алгоритмами

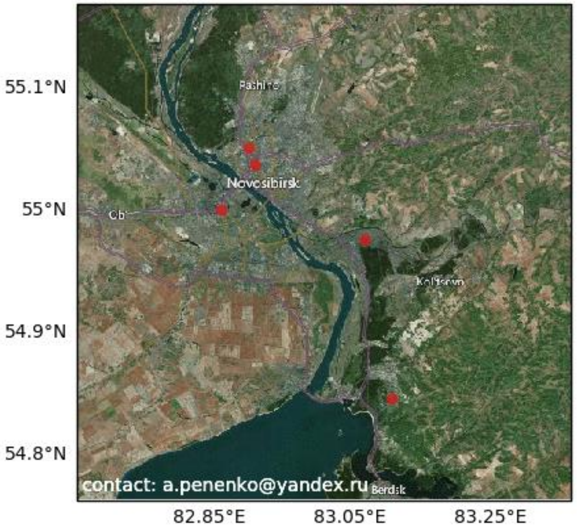
Композитный алгоритм (прямые алгоритмы для стадий переноса и итерационный для стадии трансформации)

- Обмен информацией между стадиями усвоения только через прямую задачу (внутри + сопряжённая)
- Прямые алгоритмы для контактных измерений
- Распределение измерений по стадиям расщепления

Data assimilation
3D model with chemical transformation

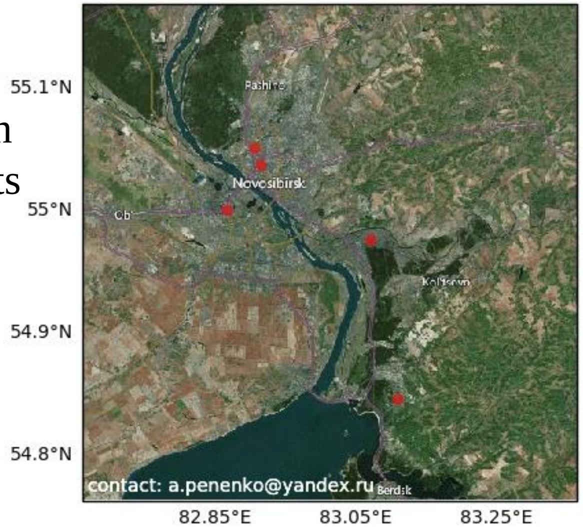
«Exact solution»

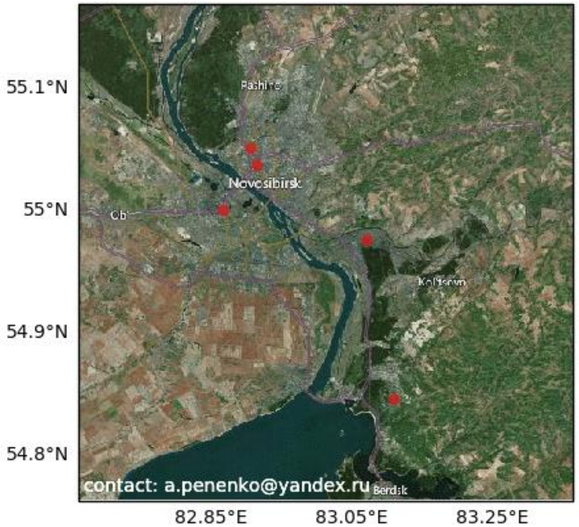




«NO DA»

Data assimilation
Routine pollutants
modification





Data assimilation
Rare pollutants
modification

Алгоритмы с произвольными длинами окон усвоения (в том числе на основе ансамблей сопряжённых функций)

Градиентные алгоритмы

(идентификация источников)

Задан целевой функционал

$$J(\mathbf{r}) = \sum_{l \in L_{mes}} \left\| \varphi_l[\mathbf{r}] - I_l \right\|^2_{L_2(\Omega_T)} \rho_l .$$

Если параметры достаточно гладкие, то

$$\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}] \Rightarrow \mathbf{h} = \left\{ \begin{cases} 2(\varphi_l[\mathbf{r}] - I_l), l \in L_{mes} \\ 0, l \notin L_{mes} \end{cases} \right\}_{l=1}^{N_c} \Rightarrow \nabla J(\mathbf{r}) = \Psi[\varphi[\mathbf{r}], \varphi[\mathbf{r}], \mathbf{h}],$$

Например, алгоритм Полака-Рибьера, реализованный в GSL

$$\mathbf{r}^{(\mathbf{k}+1)} := \mathbf{r}^{(\mathbf{k})} - \alpha^{(k)} \mathbf{s}^{(\mathbf{k})},$$

$$\alpha^{(k)} = \arg\min_{\alpha > 0} J\left(\mathbf{r}^{(\mathbf{k})} - \alpha \mathbf{s}^{(\mathbf{k})}\right),$$

$$\mathbf{s}^{(\mathbf{k})} = \begin{cases} \mathbf{g}^{(\mathbf{k})} + \beta^{(k)} \mathbf{s}^{(\mathbf{k}\text{-}1)}, & k > 1 \\ \mathbf{g}^{(\mathbf{k})}, & k = 1 \end{cases},$$

$$\beta^{(k)} = \frac{\left\langle \mathbf{g}^{(\mathbf{k})}, \mathbf{g}^{(\mathbf{k})} - \mathbf{g}^{(\mathbf{k}\text{-}1)} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{g}^{(\mathbf{k}\text{-}1)}, \mathbf{g}^{(\mathbf{k}\text{-}1)} \right\rangle}, \quad \mathbf{g}^{(\mathbf{k})} = -\nabla_r J(\mathbf{r}^{(\mathbf{k})}).$$

Распараллеливание:

- **Схема расщепления для прямых и сопряжённых задач.**
- Ensemble approach in the special case when adjoint is independent on the direct problem solution [Karchevsky, A., Eurasian journal of mathematical and computer applications, 2013 , 1 , 4-20] (~2x speed-up)

Adjoint Problem for Large Assimilation Windows

The equation in variations for the split scheme

$$\delta\phi^j = 0,\ j = 0,$$

$$A_\xi^{j-0.5}\delta\phi_{[\xi]}^j = B_\xi^{j-0.5}\delta\phi^{j-1} + C_\xi^{j-0.5}\gamma_\xi\delta r^{j-0.5},$$

$$j = 1,\dots,N_t - 1,\ \xi \in \Xi,$$

$$\delta\phi^j = \sum_\xi \gamma_\xi \delta\phi_{[\xi]}^j,\ j = 1,\dots,N_t - 1,\ \sum_\xi \gamma_\xi = 1,\ \gamma_\xi \geq 0.$$

Adjoint equations

$$\Psi^j = \begin{cases} \sum_\xi \gamma_\xi \left(B_\xi^{j-0.5}\right)^* \psi_\xi^j \delta t^j, 1 \leq j \leq N_t - 2 \\ 0,\ j = N_t - 1 \end{cases},\ j = 1,\dots N_t - 1,$$

$$\left(A_\xi^{j-0.5}\right)^* \psi_\xi^j = \frac{1}{\delta t^j}\Psi^{j+1} + h^j,\ j = 1,\dots N_t - 1,$$

Lagrange type identity

$$\sum_{j=1}^{N_t-1} \left\langle \delta\phi^j, h^j \right\rangle \delta t^j = \sum_{j=1}^{N_t-1} \left\langle \delta r^j, \sum_\xi \gamma_\xi^2 \left(C_\xi^j\right)^* \psi_\xi^j \right\rangle \delta t^j.$$

Sensitivity operator element

$$\psi^j[r^{(2)}, r^{(1)}, h] = \sum_\xi \gamma_\xi^2 \left(C_\xi^j\right)^* \psi_\xi^j$$

Penenko, A.; Penenko, V.; Tsvetova, E. & Mukatova, Z. Consistent Discrete-Analytical Schemes for the Solution of the Inverse Source Problems for Atmospheric Chemistry Models with Image-Type Measurement Data // Finite Difference Methods. Theory and Applications, Springer International Publishing, 2019 , 378-386

ИВМиМГ

Sensitivity operator

(inverse source problem)

Image (model) to structure operator [Dimet et al,2015]

(To control the data considered)

Given Ξ functions $U=\left\{\mathbf{u}^{(\xi)}\right\}_{\xi\in\Xi}\subset SpanU_{meas}$

$$H_U\left(\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(2)}]-\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(1)}]\right)=\sum_{\xi\in\Xi}\left\langle \boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(2)}]-\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(1)}],\mathbf{u}^{(\xi)}\right\rangle \mathbf{e}^{(\xi)}$$

Sensitivity relation
(Lagrange type identity)

$$\left\langle \boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(2)}]-\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}^{(1)}],\mathbf{u}^{(\xi)}\right\rangle =\left\langle \Psi[\mathbf{r}^{(2)},\mathbf{r}^{(1)};\mathbf{u}^{(\xi)}],\mathbf{r}^{(2)}-\mathbf{r}^{(1)}\right\rangle$$

Sensitivity operator

$$M_U[\mathbf{r}^{(2)},\mathbf{r}^{(1)}]:\begin{cases} R\to\mathbb{R}^{\Xi} \\ \mathbf{z}\mapsto\sum_{\xi\in\Xi}\left\langle \boldsymbol{\Psi}[\mathbf{r}^{(2)},\mathbf{r}^{(1)};\mathbf{u}^{(\xi)}],\mathbf{z}\right\rangle \mathbf{e}^{(\xi)}, \end{cases}$$

Parallel w.r.t. U

The inverse problem solution $\mathbf{r}^{(*)}$ for any $\mathbf{r}$ and U satisfy

$$H_U\left(\mathbf{I}-\Pr_{U_{mes}}\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{r}]\right)=M_U[\mathbf{r}^{(*)},\mathbf{r}]\left(\mathbf{r}^{(*)}-\mathbf{r}\right)+H_U\delta\mathbf{I}.$$

Parametric family of quasi-linear operator equations

Idea: [Marchuk G. I., On the formulation of certain inverse problems, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 156:3 (1964), 503–506]

Inversion algorithm

$$H_U\left(\mathbf{I}-\Pr_{U_{mes}}\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{q}]\right)=m_U[\mathbf{q},\mathbf{q}]\left(\mathbf{q}^{(*)}-\mathbf{q}\right)+\left(m_U[\mathbf{q}^{(*)},\mathbf{q}]-m_U[\mathbf{q},\mathbf{q}]\right)\left(\mathbf{q}^{(*)}-\mathbf{q}\right)+H_U\boldsymbol{\delta}\mathbf{I},$$

$$m\leftarrow m_U[q,q] \quad (\Xi\times N_{unknowns}) \qquad N_{unknowns}=\begin{cases}|L_{src}|\cdot N_t\cdot N_x\cdot N_y, & \text{inverse source problem}\\ N_{coeff}, & \text{inverse coefficient problem}\end{cases}$$

Newton-Kantorovich -type update

$$\boldsymbol{\delta}\mathbf{q}=\left(\begin{cases}m^T\left[mm^T\right]_\Sigma^+, & \Xi<N_{unknowns}\\ \left[m^Tm\right]_\Sigma^+m^T, & \Xi>N_{unknowns}\end{cases}\right)H_U\left(I-\Pr_{U_{mes}}\boldsymbol{\varphi}[\mathbf{q}]\right).$$

$[C]_\Sigma^+$ -truncated SVD inversion parametrized by conditional number Σ

Nonlinearity: sequential increase of the conditional number

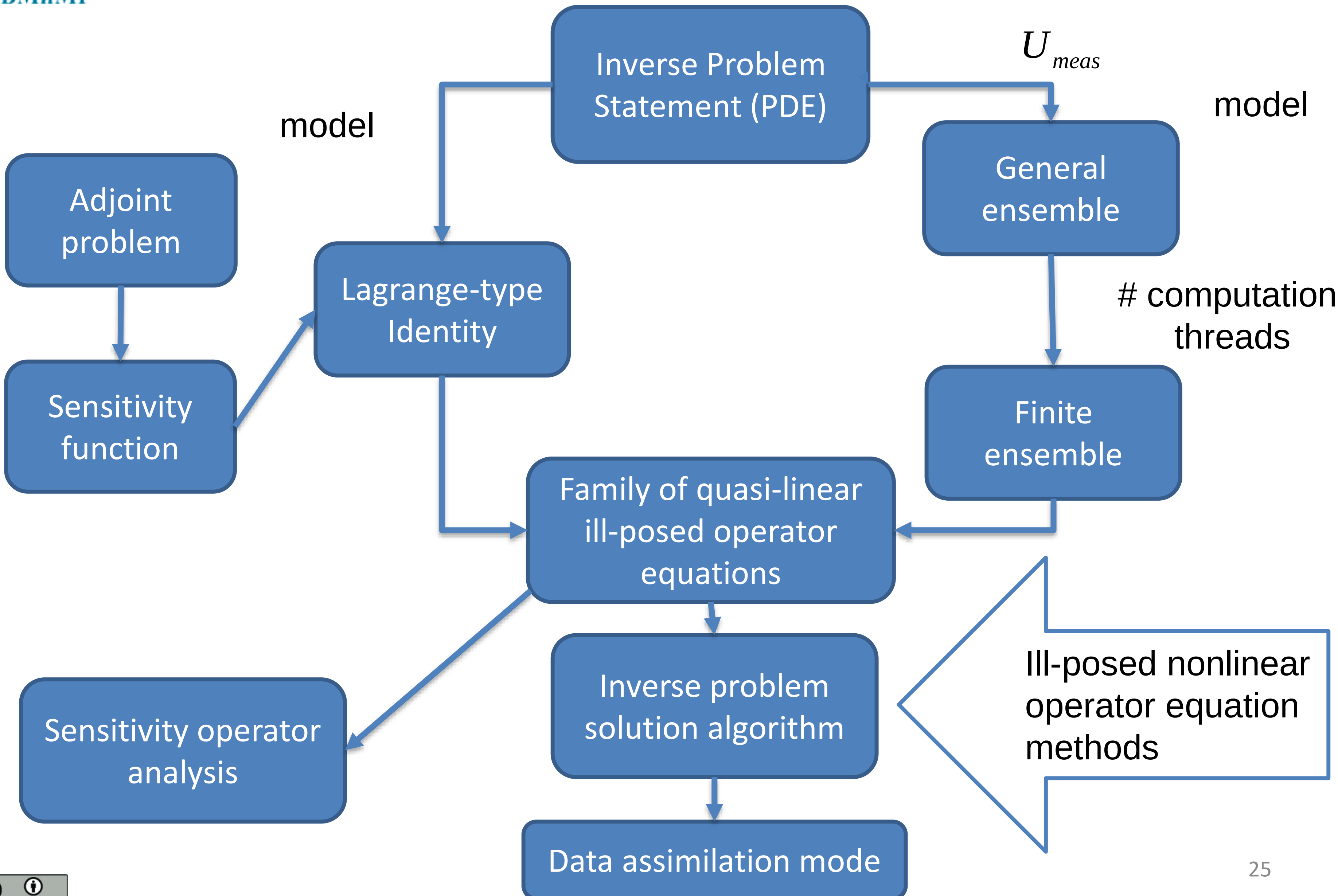
Noise: discrepancy principle

Admissible solutions: projection regularization

Optional monotonicity: monotonic decrease of the discrepancy

Theoretical foundations: [Issartel, J.-P., 2003], [Cheverda V.A., Kostin V.I., 1995], [Bakushinskiy, Goncharsky. 1989], [Kaltenbacher et al, 2008], [Vainikko, Veretennikov, 1986]

Adjoint ensemble methods



Inverse source problem (0D)

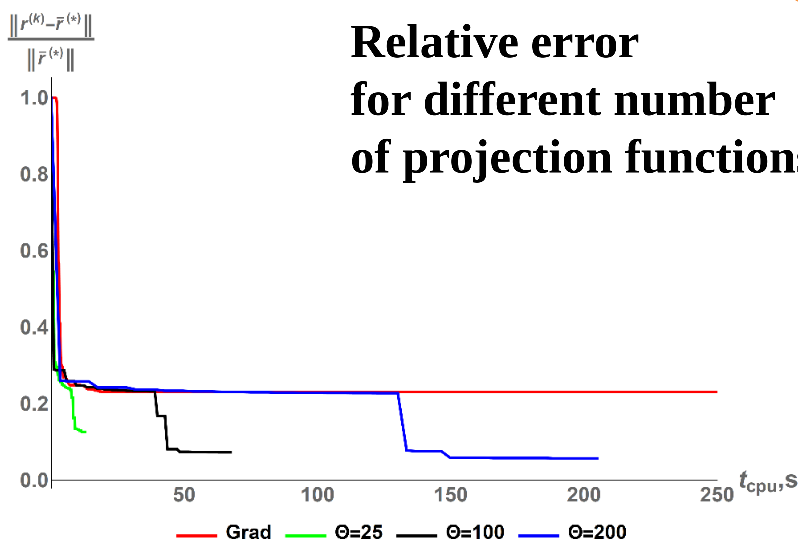
$$hv + NO_2 \to NO + O_3P \qquad hv + O_3 \to O^1D + O_2$$
$$HCHO + hv \to CO + 2HO_2 \qquad HCHO + hv \to CO + H_2$$
$$O_2 + O_3P \to O_3 \qquad N_2 + O^1D \to N2 + O_3P$$
$$O^1D + O_2 \to O_2 + O_3P \qquad H_2O + O^1D \to 2OH$$
$$HO_2 + NO \to NO_2 + OH \qquad NO + O_3 \to NO_2 + O_2$$
$$NO + RO_2 \to HCHO + HO_2 + NO_2 \qquad CO + OH \to CO_2 + HO_2$$
$$HC + OH \to H_2O + RO_2 \qquad HCHO + OH \to CO + H_2O + HO_2$$
$$NO_2 + OH \to HNO_3 \qquad 2HO_2 \to H_2O_2 + O_2$$
$$H_2O + 2HO_2 \to H_2O + H_2O_2 + O_2 \qquad HO_2 + RO_2 \to O_2 + ROOH$$
$$2RO_2 \to HCHO + HO_2 \qquad OH + SO_2 \to HO_2 + SULF.$$

Modified [Stockwell,2002] $N_c = 22$

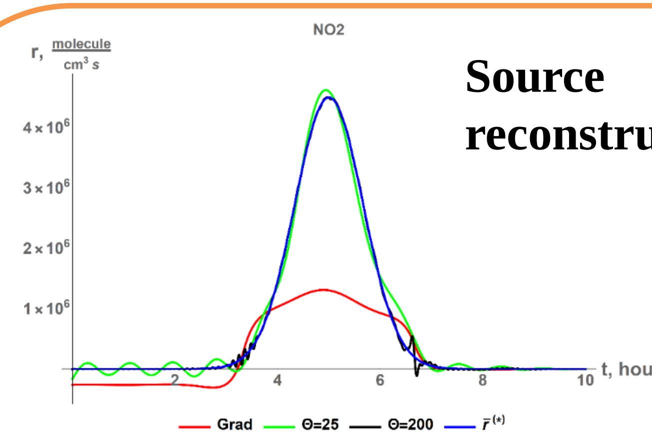
$$L_{mes} = \{CO_2, O_3\}$$
$$r^{(0)} = 0$$

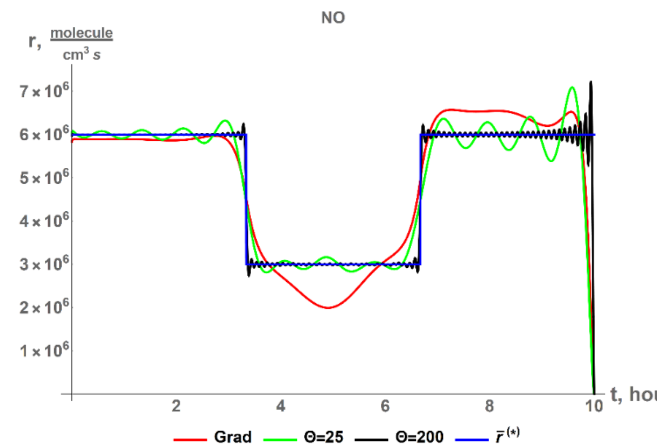
$$T = 10 \times 3600$$
$$N_t = 3000$$

Relative error for different number of projection functions



Source reconstruction



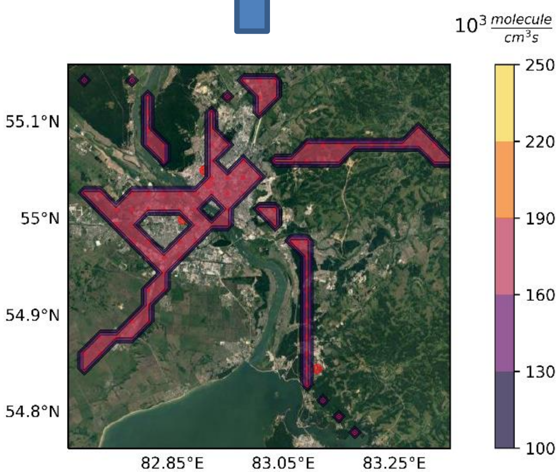


Penenko, A. V. A Newton–Kantorovich Method in Inverse Source Problems for Production-Destruction Models with Time Series-Type Measurement Data // Numerical Analysis and Applications, 2019 , 12 , 51-69

Sources identification with direct and indirect *in situ* (5 sites) measurements

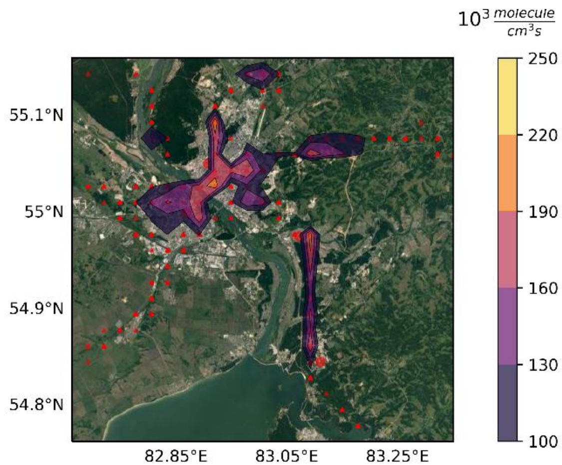
$T = 4 \times 24 \times 3600 \qquad \Xi = 5 \times 10$

Измеряется NO

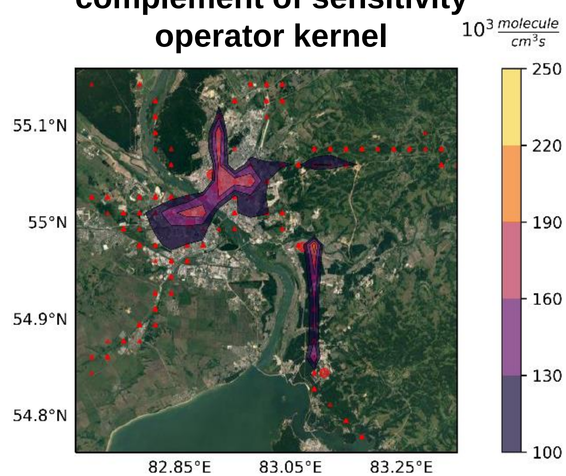


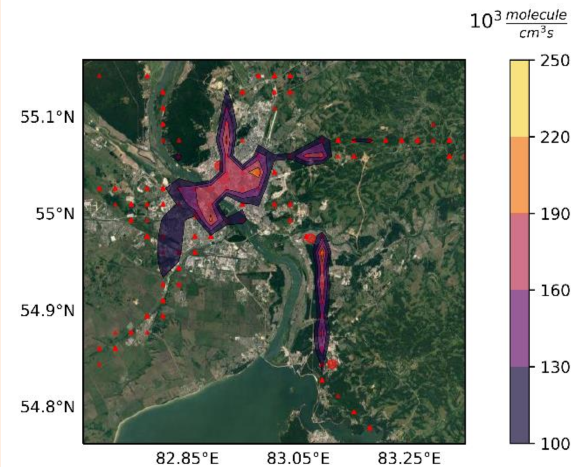
Exact **stationary** NO source function (city traffic)

Измеряется O3

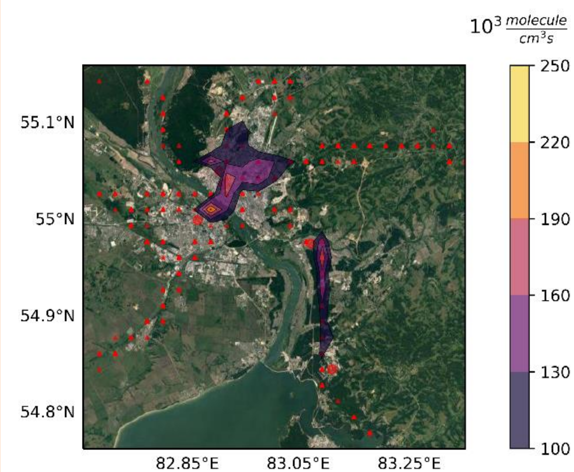


Projection to orthogonal complement of sensitivity operator kernel





Восстановленные источники

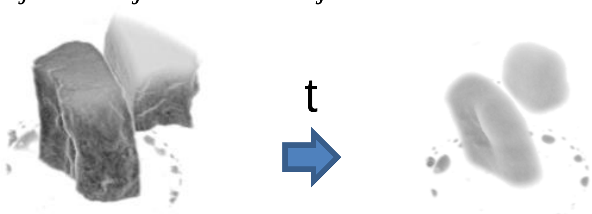


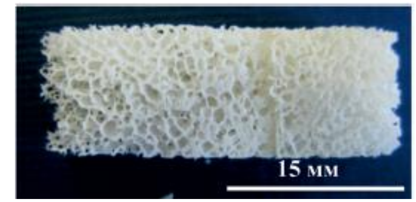
V. V. Penenko A. V. Penenko, E. A. Tsvetova and A. V. Gochakov Methods for studying the sensitivity of atmospheric quality models and inverse problems of geophysical hydrothermodynamics // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics, 2019, Vol. 60, No. 2, pp. 392–399.

Восстановление коэффициента диффузии по томографическим снимкам(2D)

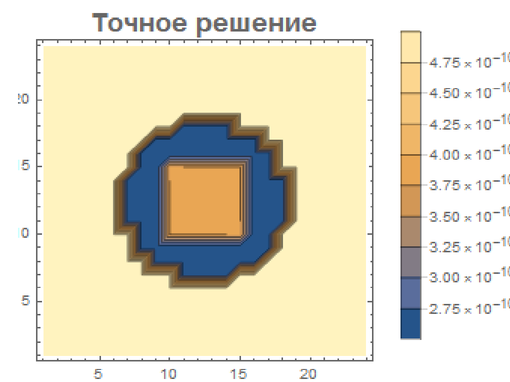
$$\varphi_t(x,t) = \nabla\cdot(\mu(x)\nabla\varphi(x,t)), (x,t)\in\Omega\times[0,T]$$
$$\varphi(x,t) = \varphi_{\partial\Omega}(x,t), x\in\partial\Omega, t\in[0,T],$$
$$\varphi(x,t) = I_0(x), t=0, x\in\Omega.$$

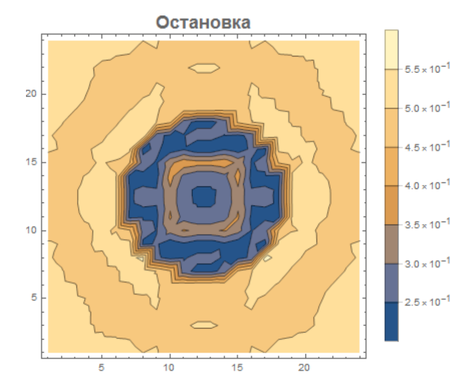
$$\varphi(x,t_j) = I_j(x) + \delta I_j(x), x\in\Omega,\ j=1,\dots,M.$$

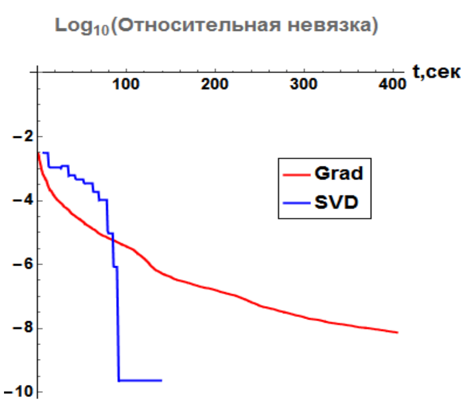




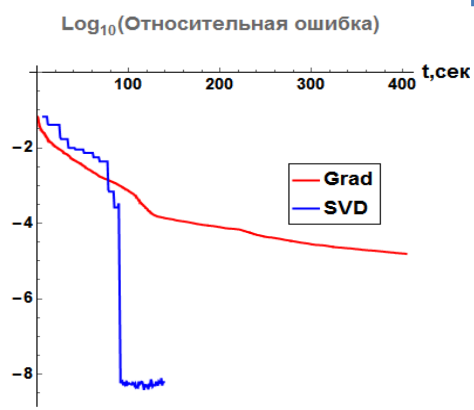
$$k(x) > k_{\min} > 0,\ x\in\Omega.$$







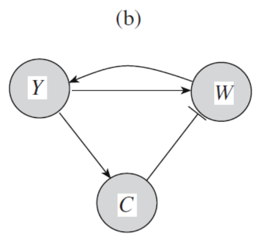
(a)



(b)

Penenko, A. V.; Nikolaev, S. V.; Golushko, S. K.; Romashenko, A. V. & Kirilova, I. A. Numerical Algorithms for Diffusion Coefficient Identification in Problems of Tissue Engineering // Math. Biol. Bioinf., 2016 , 11 , 426-444 doi: 10.17537/2016.11.426 (In Russian)

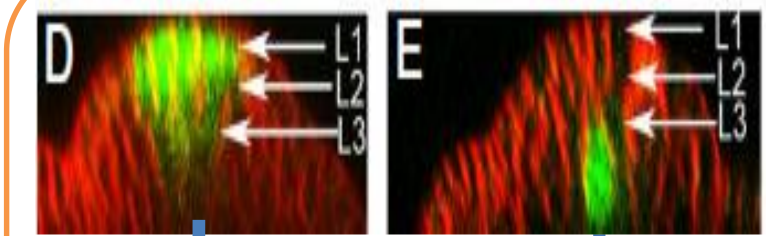
Hypothetical morphogen synthesis region estimation (2D)



Given: stationary φ_C, φ_W,

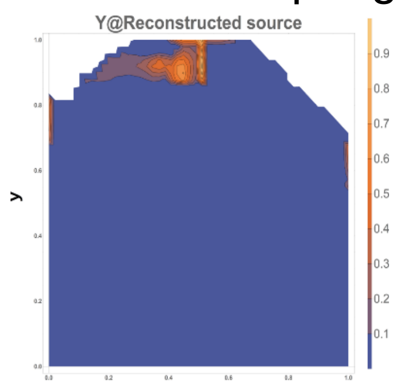
Find: non-negative, constant r_Y in time

$$P(\varphi)=\begin{bmatrix} d_Y \\ d_C \\ d_W \end{bmatrix}, \quad \Pi(\varphi)=\begin{bmatrix} 0 \\ v_C\, g\left(h_C + T_{CY}\varphi_Y\right) \\ v_W\, g(h_W + T_{WY}\varphi_Y + T_{WC}\varphi_C) \end{bmatrix}$$

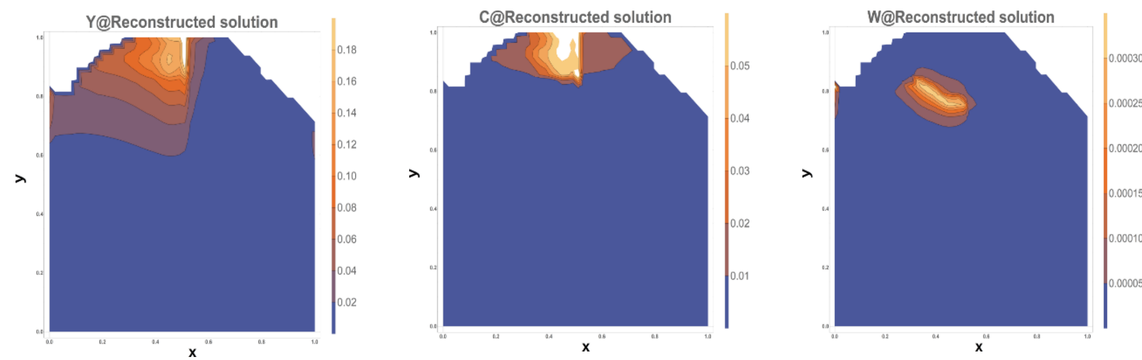


Yadav, R. K.; Girke, T.; Pasala, S.; Xie, M. & Reddy, G. V. Gene expression map of the Arabidopsis shoot apical meristem stem cell niche // Proceedings of the National Academy of Sciences, Proceedings of the National Academy of Sciences, 2009 , 106 , 4941-4946

Reconstructed source of hypothetical Morphogen



Reconstructed morphogen fields



Hypothetical

Observable

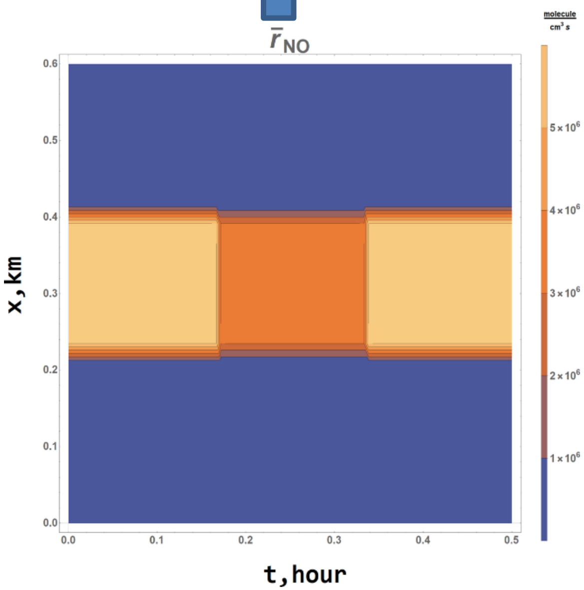
Penenko, A.; Zubairova, U.; Mukatova, Z. & Nikolaev, S. Numerical algorithm for morphogen synthesis region identification with indirect image-type measurement data // Journal of Bioinformatics and Computational Biology, World Scientific Pub Co Pte Lt, 2019 , 17 , 1940002

Data assimilation mode (2D)

(data assimilation problem = sequence of inverse problems)

Exact source

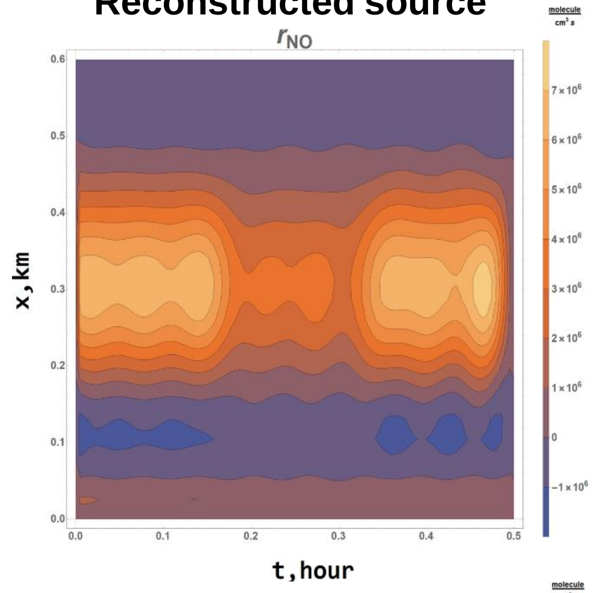
«Inverse problem mode»
(1 assimilation window)

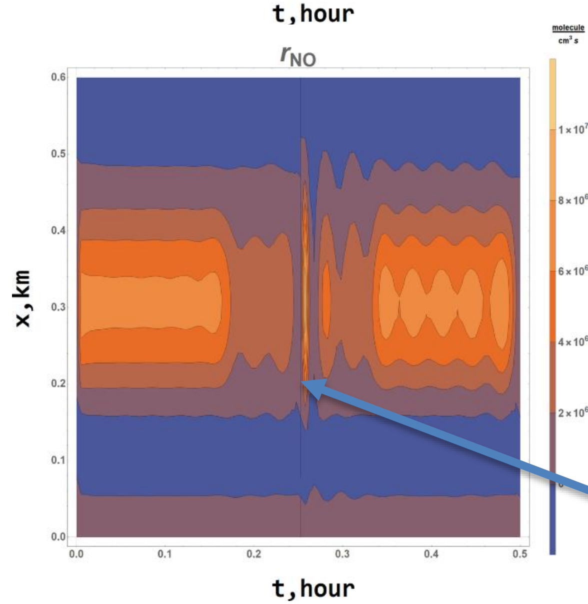


«Data assimilation mode»
(2 assimilation windows)

«4DNK» algorithm

Reconstructed source





Assimilation window boundary

Source: NO

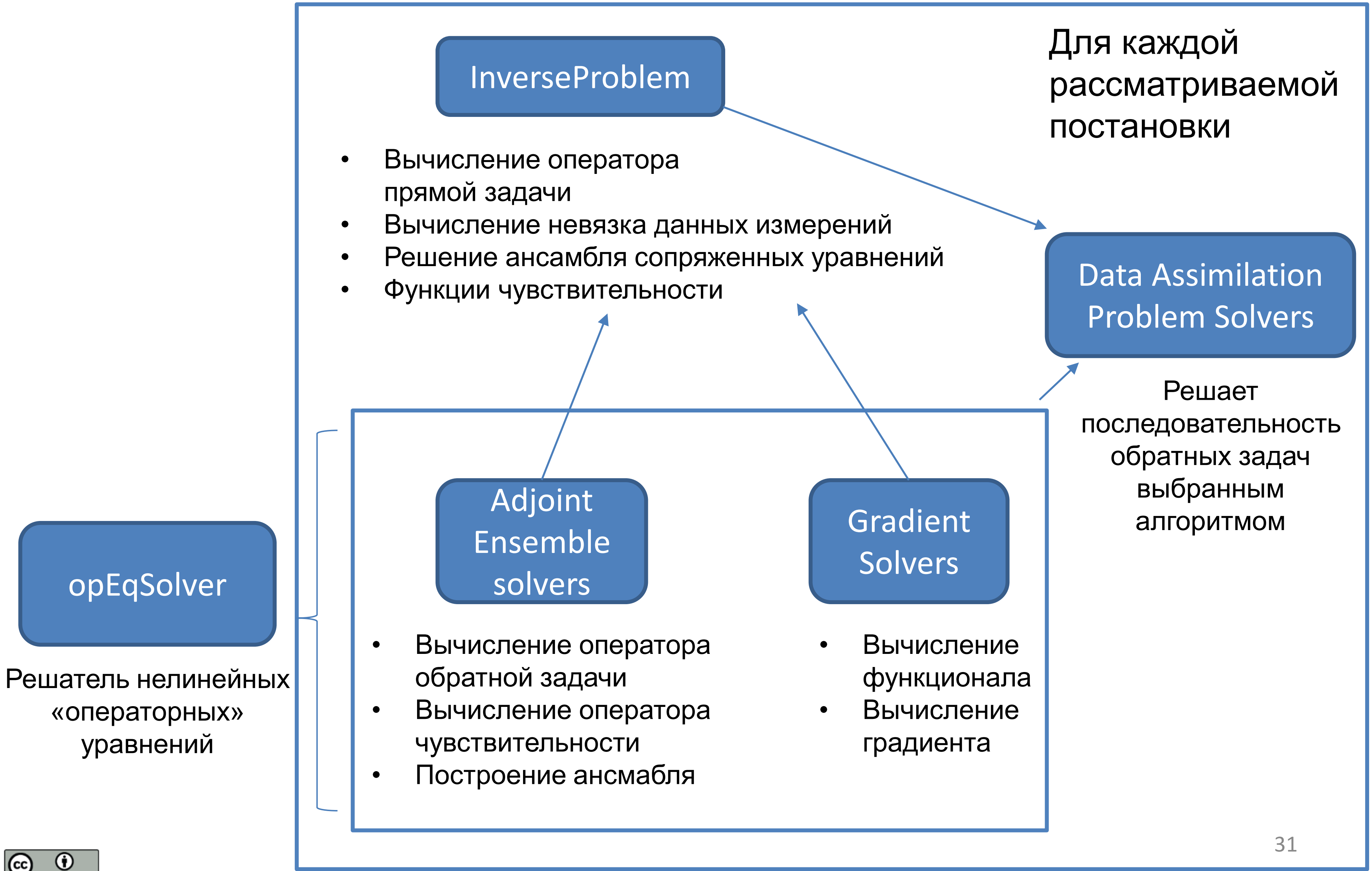
Measurements: O_3 concentration images (movies)

Initial guess: zero

$$T = 0.5 \times 3600$$
$$N_t = 100$$
$$X = Y = 600$$
$$N_x = 100$$
$$\theta_x = \theta_y = 5$$
$$\theta_t = 10$$

[Penenko, A. V. Algorithms for the inverse modelling of transport and transformation of atmospheric pollutants // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, IOP Publishing, 2018 , 211 , 012052]

Архитектура алгоритмов с произвольными окнами усвоения



Окружение IMDAF

Положения, выносимые на защиту

- Наборы согласованных в смысле тождества Лагранжа дискретно-аналитических численных схем и схемы расщепления для шкалы моделей адвекции-диффузии-реакции различной пространственной размерности и градиенты функционалов невязки на их основе.
- Прямой алгоритм усвоения данных для одномерной модели адвекции-диффузии и контактных данных измерений. Изучена связь между результатом работы алгоритма и точным решением задачи усвоения данных.
- На основе прямого алгоритма усвоения данных разработаны оригинальные вариационные алгоритмы усвоения данных с усвоением на отдельных стадиях схемы расщепления.
- Разработана процедура выбора параметра регуляризации на основе сценарного подхода.
- Для уравнений адвекции-диффузии-реакции с использованием операторов чувствительности построены модели систем дистанционного и контактного мониторинга, а также систем интерпретации изображений. Модели имеют вид семейств квазилинейных операторных уравнений.
- Разработаны алгоритмы типа Ньютона-Канторовича для решения квази-линейных операторных уравнений на основе оператора чувствительности. Разработанные алгоритмы протестированы для решения прикладных задач в областях моделирования химии атмосферы и живых систем. Созданы алгоритмы для работы в потоковом режиме, то есть в режиме усвоения данных.
- **Реализованная в объектно-ориентированном подходе система обратного моделирования IMDAF (Inverse Modeling and Data Assimilation Framework), включающая процедуры препроцессинга (подготовки параметров моделей по разнородным источникам), расчета на системах с общей памятью и визуализации.**

Публикации по усвоению данных

1. Penenko, A. V.; Penenko, V. V. & Tsvetova, E. A. Sequential data assimilation algorithms for air quality monitoring models based on a weak-constraint variational principle // **Numerical Analysis and Applications**, Pleiades Publishing Ltd, 2016 , 9 , 312-325 doi: 10.1134/s1995423916040054
2. Penenko, V. V.; Penenko, A. V. & Tsvetova, E. A. Variational approach to the study of processes of geophysical hydro-thermodynamics with assimilation of observation data // **Journal of Applied Mechanics and Technical Physics**, 2017 , 58 , 771–778 doi: 10.1134/S0021894417050029
3. Penenko, A.; Mukatova, Z. S.; Penenko, V. V.; Gochakov, A. & Antokhin, P. N. Numerical study of the direct variational algorithm of data assimilation in urban conditions // **Atmospheric and ocean optics**, 2018 , 31 , 456-462 doi: 10.15372/AOO20180606
4. Penenko, A.V.; Khassenova, Z.T.; Penenko, V.V. & Pyanova, E.A. Numerical study of a direct variational data assimilation algorithm in Almaty city conditions // **Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications**, L. N. Gumilyov Eurasian National University, 2019 , 7 , 53-64 doi: 10.32523/2306-6172-2019-7-1-53-64
5. Penenko, A. V. & Penenko, V. V. Direct data assimilation method for convection-diffusion models based on splitting scheme // **Computational technologies**, 2014 , 19 , 69-83 (In Russian)
6. Grishina, A. A. & Penenko, A. V. Chemical kinetics modelling with variational data assimilation schemes // **Computational technologies**, 2017 , 22 , 27-43 (In Russian)

Публикации по сопряженным ансамблям

8. Penenko, A.; Zubairova, U.; Mukatova, Z. & Nikolaev, S. Numerical algorithm for morphogen synthesis region identification with indirect image-type measurement data // **Journal of Bioinformatics and Computational Biology**, 2019 , 17 , 1940002 doi:10.1142/s021972001940002x
9. V. V. Penenko A. V. Penenko, E. A. Tsvetova and A. V. Gochakov Methods for studying the sensitivity of atmospheric quality models and inverse problems of geophysical hydrothermodynamics // **Journal of Applied Mechanics and Technical Physics**, 2019, Vol. 60, No. 2, pp. 392–399 doi: 10.1134/S0021894419020202
10. Penenko, A. V. A Newton–Kantorovich Method in Inverse Source Problems for Production-Destruction Models with Time Series-Type Measurement Data // **Numerical Analysis and Applications**, 2019 , 12 , P. 51-69 doi:10.1134/s1995423919010051
11. Penenko, A. V. Consistent Numerical Schemes for Solving Nonlinear Inverse Source Problems with Gradient-Type Algorithms and Newton–Kantorovich Methods // **Numerical Analysis and Applications**, 2018 , 11 , P.73-88 doi: 10.1134/s1995423918010081
12. Penenko, A. V.; Nikolaev, S. V.; Golushko, S. K.; Romashenko, A. V. & Kirilova, I. A. Numerical Algorithms for Diffusion Coefficient Identification in Problems of Tissue Engineering // **Math. Biol. Bioinf.**, 2016 , 11 , 426-444 doi: 10.17537/2016.11.426 (In Russian)
13. Penenko, A. On a solution of the inverse coefficient heatconduction problem with the gradient projection method // **Siberian electronic mathematical reports**, 2010, 23 , 178-198. (in Russian)

Публикации
по численным схемам

14. Penenko, V.; Tsvetova, E. & Penenko, A. Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies // **Computers & Mathematics with Applications**, Elsevier BV, 2014 , 67 , 2240-2256 doi: 10.1016/j.camwa.2014.04.004
15. Penenko, A. V. Discrete-analytic schemes for solving an inverse coefficient heat conduction problem in a layered medium with gradient methods // **Numerical Analysis and Applications**, Pleiades Publishing Ltd, 2012 , 5 , 326-341 doi: 10.1134/s1995423912040052
16. Penenko, A. V.; Sorokovoy, A. A. & Sorokovaya, K. E. Numerical model of bioaerosol transformation in the atmosphere // **Atmospheric and Oceanic Optics**, Pleiades Publishing Ltd, 2016 , 29 , 570-574 doi: 10.1134/s1024856016060117
17. Zubairova, U.; Nikolaev, S.; Penenko, A.; Podkolodnyy, N.; Golushko, S.; Afonnikov, D. & Kolchanov, N. Mechanical Behavior of Cells within a Cell-Based Model of Wheat Leaf Growth // **Frontiers in Plant Science**, Frontiers Media SA, 2016 , 7 doi: 10.3389/fpls.2016.01878
18. Penenko, A.V.; Troeglazova, T.S.; Zubairova, U.S.; Bayshibaev, D.Z. & Nikolaev, S.V. Usage of Parallel Algorithms Based on CUDA Technology for Realisation of Reaction-Diffusion Models of Two-Dimensional Cellular Ensemble // **Mathematical Biology and Bioinformatics**, Institute of Mathematical Problems of Biology of RAS (IMPB RAS), 2014 , 9 , 491-503 doi: 10.17537/2014.9.491 (in Russian)

Публикации по вариационным методам

19. Penenko, V. V.; Tsvetova, E. A. & Penenko, A. V. Development of variational approach for direct and inverse problems of atmospheric hydrodynamics and chemistry // **Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics**, Pleiades Publishing Ltd, 2015 , 51 , 311-319 doi: 10.1134/s0001433815030093
20. Penenko, V. V.; Tsvetova, E. A. & Penenko, A. V. Methods based on the joint use of models and observational data in the framework of variational approach to forecasting weather and atmospheric composition quality // **Russian Meteorology and Hydrology**, Allerton Press, 2015 , 40 , 365-373 doi: 10.3103/s1068373915060023
21. Antokhin, P.; Penenko, A. & Antokhina, O. Algorithm for restoring the vertical distribution of sources and sinks of the substance in the boundary layer of the atmosphere // **Atmospheric and ocean optics**, 2018 , 31 , 49-56 (In Russian) doi: 10.15372/AOO20180108
22. Kabanikhin, S. I. & Penenko, A. V. Convergence analysis of gradient descend methods generated by two different functionals in a backward heat conduction problem // **Journal of Inverse and Ill-posed Problems**, Walter de Gruyter GmbH, 2009 , 17 doi: 10.1515/jiip.2009.042
23. Kabanikhin, S. I.; Hasanov, A. & Penenko, A. V. A gradient descent method for solving an inverse coefficient heat conduction problem // **Numerical Analysis and Applications**, Pleiades Publishing Ltd, 2008 , 1 , 34-45 doi: 10.1134/s1995423908010047

Спасибо за внимание!

Литература

1. Penenko, V. V. & Obraztsov, N. N. A variational initialization method for the fields of the meteorological elements // English translations Soviet Meteorology and Hydrology, 1976 , 11 , 3-16
2. Penenko, V. Methods for numerical simulation of atmospheric processes // Hydrometeoizdat, 1981
3. Bennett, A. F. Inverse Methods in Physical Oceanography (Cambridge Monographs on Mechanics) Cambridge University Press, 1992
4. Iglesias, M. A. & Dawson, C. An iterative representer-based scheme for data inversion in reservoir modeling//Inverse Problems, IOP Publishing, 2009 , 25 , 1-34
5. Marchuk G. I., On the formulation of certain inverse problems, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 156:3 (1964), 503–506 (In Russian).
6. Marchuk, G. I. Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems Springer Netherlands, 1995
7. Issartel, J.-P. Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements // Atmospheric Chemistry and Physics, Copernicus GmbH, 2003 , 3 , 2111-2125
8. Cheverda V.A., Kostin V.I. r-pseudoinverse for compact operators in Hilbert space: existence and stability. J. Inverse and Ill-Posed Problems. 1995. V.3. № 2. P. 131–148. doi: 10.1515/jiip.1995.3.2.131.
9. Kaltenbacher B. Some Newton-type methods for the regularization of nonlinear ill-posed problems. Inverse Problems. 1997. V.13. № 3. P. 729–753. doi: 10.1088/0266-5611/13/3/012.
10. Vainikko, G. M.,Veretennikov, A. Yu. Iterative procedures in ill-posed problems Moskow, Nauka, 1986 (In Russian).
11. Stockwell, W. R. Comment on “Simulation of a reacting pollutant puff using an adaptive grid algorithm” by R.K. Srivastava et al. // Journal of Geophysical Research, Wiley-Blackwell, 2002 , 107 , 4643-4650
12. Dimet, F.-X. L.; Souopgui, I.; Titaud, O.; Shutyaev, V. & Hussaini, M. Y. Toward the assimilation of images // Nonlinear Processes in Geophysics, Copernicus GmbH, 2015 , 22 , 15-32
13. Penenko, V. V. & Tsvetova, E. A. Variational methods of constructing monotone approximations for atmospheric chemistry models // Numerical Analysis and Applications, Pleiades Publishing Ltd, 2013 , 6 , 210-220
14. Hesstvedt, E.; Hov, O. & Isaksen, I. S. Quasi-steady-state approximations in air pollution modeling: Comparison of two numerical schemes for oxidant prediction // International Journal of Chemical Kinetics, Wiley-Blackwell, 1978 , 10 , 971-994

Adjoint problem solution ensembles in inverse problem algorithms

Cost function based

- **Cost functional gradients with adjoint problem solution** (single element ensemble for the discrepancy).
- **Gradient computation with adjoint ensemble when adjoint is independent of direct solution** [Karchevsky, A., Eurasian journal of mathematical and computer applications, 2013 , 1 , 4-20]
- **Representer method (optimality system decomposition, ensemble generated for discrepancies for each measurement data)** [Bennett, A. F. Inverse Methods in Physical Oceanography (Cambridge Monographs on Mechanics) Cambridge University Press, 1992]

Sensitivity relation based

- **Coarse-fine mesh method (Sequential solution refinement with sequential adjoint problems solving)** [Hasanov, A.; DuChateau, P. & Pektas, B. An adjoint problem approach and coarse-fine mesh method for identification of the diffusion coefficient in a linear parabolic equation// Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 2006 , 14 , 1-29]
- **Adjoint function for each measurement datum with the solution of the resulting operator equation** [Marchuk G. I., On the formulation of certain inverse problems, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 156:3 (1964), 503–506],
  - Passive tracer (linear) case: [Issartel, J.-P. Rebuilding sources of linear tracers after atmospheric concentration measurements // Atmospheric Chemistry and Physics, Copernicus GmbH, 2003 , 3 , 2111-2125]
  - Nonlinear case, pointwise sources: [Mamonov, A. V. & Tsai, Y.-H. R. Point source identification in nonlinear advection-diffusion-reaction systems Inverse Problems, IOP Publishing, 2013 , 29 , 035009]