ДОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

10 • 2007

ІНФОРМАТИКА ТА КІБЕРНЕТИКА

УДК 517.977

Член-кореспондент НАН України **С. І. Ляшко, Д. А. Клюшин, В. В. Семенов, К. В. Шевченко**

Лагранжово-ейлеровий підхід до розв'язання оберненої задачі конвективної дифузії

We apply the variational strategy of solving inverse problems to identify the power of point sources of contamination in ground water basing on the data observed in control wells. To solve the initial-boundary problem, we use the Lagrangian–Eulerian approach to finite-difference schemes approximating the convection-diffusion equation. Our investigation has shown the effectiveness of the joint variational and Lagrangian–Eulerian approach to solving the inverse problems of identification of point sources of contamination in ground water.

1. У параболічних задачах відновлення параметрів джерел забруднення підземних вод, як і в багатьох прикладних задачах інших галузей, виникає ряд проблем, пов'язаних з тим, що в правих частинах рівняння стану системи містяться сингулярні узагальнені функції (імпульсне, точкове, рухоме керування тощо). На перший план виходить проблема стійкого розв'язання прямої та оберненої крайових задач конвективної дифузії. Застосування чисельних методів для розв'язування таких задач дозволяє найбільш повно наблизити модельні математичні уявлення до реальних природних умов. Але чисельні методи розв'язування обернених задач повинні базуватися на добре розробленій теорії наближених методів розв'язання прямих задач. В роботі А. А. Самарського [1] досліджена загальна стратегія розв'язування задач ідентифікації джерел для параболічного рівняння з використанням варіаційного формулювання оберненої задачі. Для згаданої вище задачі можна використовувати і більш прості обчислювальні алгоритми, основані, наприклад, на прямій реалізації методу Гальоркіна — лінійної суперпозиції розв'язків від пробних точкових джерел. Досить грунтовний огляд літератури відносно застосування чисельних методів оптимізації градієнтного типу для розв'язання обернених задач наведено в роботі С. І. Кабаніхіна [2]. В роботах С. І. Ляшка [3, 4] досліджено застосування методу Гальоркіна для багатьох систем математичної фізики.

Найчастіше при розв'язуванні рівнянь геоміграції застосовується метод скінченних різниць та метод скінченних елементів, загальні положення яких описані, наприклад, у Л. Лукнера, В. М. Шестакова [5], Л. Ф. Конікова [6]. Але зробити достовірні розрахунки за стандартними різницевими схемами, що апроксимують рівняння переносу, можна лише при виконанні жорстких обмежень на кроки просторової та часової сіток. При порушенні цих умов в чисельному розв'язку спостерігаються характерні похибки двох видів: або фронт концентрації занадто згладжений, або в ньому присутні нефізичні пилоподібні осциляції. Внаслідок специфіки реальних задач (як правило, великі лінійні розміри області, що досліджується; необхідність проведення багатоваріантних прогнозних розрахунків на довгострокові періоди часу) застосування стандартних скінченно-різницевих апроксимацій рівняння переносу значно знижує ефективність чисельного моделювання. Перевага лагранжово-ейлерового методу полягає у тому, що він дає найкращі результати при значеннях числа Куранта більших або рівних одиниці, що дозволяє збільшити розрахунковий крок за часом на 1–2 порядки порівняно з традиційними скінченно-різницевими методами [7]. Ще одна перевага полягає в тому, що запропонований метод приводить до систем різницевих рівнянь з симетричними матрицями, що дозволяє більш ефективно розв'язувати відповідні системи алгебраїчних рівнянь та значно понижує вимоги до оперативної пам'яті комп'ютера. Тому далі використовується модифікований метод характеристик — один з варіантів ефективного лагранжово-ейлерового чисельного методу розв'язання рівняння переносу, спочатку запропонованого Д. Дугласом і Т. Расселом [7], а також В. Ф. Демченком [8]. Аналіз точності лінійних схем чисельного методу наведено в роботі С. І. Ляшка, Д. А. Клюшина, А. С. Тригуба [10].

2. Постановка задачі. В обмеженій області $G = (0,T) \times \Omega$, $\Omega \in \mathbb{R}^2$, шукаємо розв'язок параболічного рівняння:

$$Lu \equiv \frac{\partial u}{\partial t} + Au = \sum_{i=1}^{p} Q_i(t)\delta(x - r_i), \qquad x \in \Omega, \qquad 0 < t \leqslant T \tag{1}$$

$$u|_{(0,T)\times\partial\Omega} = 0, \qquad u|_{t=0} = 0, \tag{2}$$

де

$$Au \equiv \sum_{\alpha=1}^{2} v_\alpha(x)\frac{\partial u}{\partial x_\alpha} - \sum_{\alpha=1}^{2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} D_\alpha(x)\frac{\partial u}{\partial x_\alpha},$$

$u(x,t)$ — концентрація забруднення в грунтових водах; $D_\alpha(x)$ — коефіцієнти дифузії; $v_\alpha(t)$ — компоненти вектора швидкості; $Q_i(t)$ — вектор невідомих значень потужностей точкових джерел та $\delta(x - r_i)$ — δ-функція Дірака, зосереджена в точці $r_i \in \Omega$.

Точки r_β визначають розташування джерел з невідомими потужностями $q_\beta(t)$. Додаткова інформація $\phi_m(t)$ інтерпретується як усереднення вимірювань $u(x,t)$ в околі ω_m деяких окремих точок $z_m \in \Omega$, $m = \overline{1,M}$. Треба визначити $q_\beta(t)$, $\beta = \overline{1,p}$, що мінімізують стандартне квадратичне відхилення $u(z_m,t)$ від $\varphi_m(t)$.

Використання варіаційного формулювання оберненої задачі (див. [1]), дозволяє перейти до задачі оптимального керування. Вважатимемо, що оптимальне керування належить гільбертовому простору $(L_2(0,T))^p$, в якому скалярний добуток визначається виразом

$$\langle X, Y\rangle = \sum_{\beta=1}^{p} \int_0^T x_\beta(t) y_\beta(t)\, dt.$$

Згладжуючий функціонал доцільно взяти у вигляді

$$J_\alpha(\overline{Q}) = \sum_{m=1}^{M} \int_0^T \left(\varphi_m(t) - \int_\Omega g_m(x) u(t,x) dx\right)^2 dt + \alpha\|\overline{Q}\|^2, \tag{3}$$

де $\overline{Q}(t) = (\overline{Q}_1(t), \ldots, \overline{Q}_p(t))^T$ — вектор керування; $g_m(x) = \chi_{\omega_m}/\operatorname{diam}\omega_m$ — ядро усереднення по області ω_m; χ_{ω_m} — індикаторна функція та $\alpha > 0$ — параметр регуляризації, що узгоджується з похибкою вимірів. Оптимальне керування $\overline{Q}^*(t) = (Q_1^*(t), \ldots, Q_p^*(t))^T$ визначається з умови мінімуму функціоналу, а саме:

$$J_\alpha(\overline{Q}^*) = \min_{\overline{Q}\in(L_2(0,T))^p} J_\alpha(\overline{Q}). \tag{4}$$

3. Існування розв'язку граничної задачі. Нехай H — поповнення простору гладких функцій, що задовольняють умови (2) за нормою:

$$\|u\|_H^2 = \int\limits_G \left(u_t^2 + \sum_{i=1}^n u_{x_i}^2 + \sum_{i,j=1}^n u_{x_ix_j}^2 \right) dG, \tag{5}$$

та нехай H_+ — аналогічний простір, що містить гладкі функції, які задовольняють граничні та початкові умови спряженої задачі. Розширимо оператор L на H за неперервністю. Маємо таке операторне рівняння:

$$Lu = f. \tag{6}$$

Застосовуючи методологію, описану в [4], отримаємо результати.

Теорема 1. *Для будь-якого елемента* $f \in (H_+)^*$ *існує єдиний слабкий розв'язок задачі* (6) *в розумінні*

$$(u, L^*v)_{L_2(G)} = \langle f, v\rangle_+, \qquad \forall v \in H_+, u \in L_2(G).$$

Теорема 2. *Нехай стан системи визначається як слабкий розв'язок задачі* (6), *з* $f = \sum\limits_{i=1}^p Q_i(t)\delta(x - r_i)$ *та множина* $U_\partial \subset (L_2(0,T))^p$ *замкнена і опукла. Тоді існує єдиний розв'язок задачі оптимального керування* $J_\alpha(Q) \to \min\limits_{Q\subset U_g}$.

4. Алгоритм. Продиференціюємо функціонал (3) та одержимо

$$J'_\alpha(\overline{Q}) = \overline{\Psi}(t) + 2\alpha\overline{Q}(t), \tag{7}$$

де $\overline{\Psi}(t) = (\psi(t, r_1), \ldots, \psi(t, r_p))$ — вектор значень розв'язку спряженої задачі у відповідних точках.

Рівняння Ейлера для квадратичного функціоналу

$$\overline{\Psi}(t) + 2\alpha\overline{Q}(t) = 0. \tag{8}$$

Загальна схема алгоритму, що повторюється, складається з трьох стадій: розв'язання прямої задачі, розв'язання спряженої задачі, знаходження нового наближення для оптимального керування.

1. Розв'язання прямої задачі

$$\frac{\partial u^{(k)}}{\partial t} + Au^{(k)} = f^{(k)}, \qquad 0 < t \leqslant T, \tag{9}$$

$$u^{(k)}(0) = g(x), \tag{10}$$

де $f^{(k)} = \sum\limits_{i=1}^p \delta(x - r_i){Q_i}^{(k)}(t)$.

2. Розв'язання спряженої задачі

$$-\frac{\partial\psi^{(k)}}{\partial t}+A^*\psi^{(k)}=2\sum_{m=1}^{M}\left\{g_m\left(\int\limits_{\Omega}g_m u^{(k)}dx-\varphi_m\right)\right\};\qquad 0\leqslant t<T, \tag{11}$$

$$\psi^{(k)}(T)=0. \tag{12}$$

3. Знаходження нового наближення для оптимального керування.

$$\frac{\overline{Q}^{(k+1)}-\overline{Q}^{(k)}}{\tau_{k+1}}+\overline{\Psi}^{(k)}+2\alpha\overline{Q}^{(k)}=0,\qquad k=0,1,\ldots. \tag{13}$$

Одним із найбільш ефективних методів розв'язання рівняння конвекції — дифузії є лагранжово-ейлеровий підхід (див. [7, 8]). Запишемо рівняння (9) в лагранжовій формі:

$$\frac{\partial u}{\partial\tau}=Au+f, \tag{14}$$

де $\partial/\partial\tau$ — субстанційна похідна

$$\frac{\partial}{\partial\tau}=\frac{\partial u}{\partial t}+c_1\frac{\partial}{\partial x_1}+c_2\frac{\partial}{\partial x_2}.$$

Для розв'язання отриманих систем лінійних алгебраїчних рівнянь застосовувалась ітераційна процедура ORTHOMIN, розроблена Вінсамом [11]:

$$A^nU^{(n,s+1)}=\varphi(U^{(n,s)}), \tag{15}$$

де A — п'ятидіагональна матриця

$$\widetilde{r}=\varphi-AU_0,\qquad r_0=(\widetilde{L}D\widetilde{U})^{-1}\widetilde{r},\qquad p_0=r_0,$$

$$z_0=(\widetilde{L}D\widetilde{U})^{-1}Ar_0,\qquad \alpha^{(s)}=\frac{\big(r^{(s)},z^{(s)}\big)}{\big(z^{(s)},z^{(s)}\big)},$$

$$U^{(n,s+1)}=U^{(n,s)}+\alpha^{(s)}p^{(s)},\qquad r^{(s+1)}=r^{(s)}-\alpha^{(s)}z^{(s)},$$

$$t^{(s+1)}=(\widetilde{L}D\widetilde{U})^{-1}Az^{(s+1)},\qquad \beta^{(s)}=-\frac{\big(t^{(s+1)},z^{(s)}\big)}{\big(z^{(s)},z^{(s)}\big)},$$

$$p^{(s+1)}=r^{(s+1)}+\beta^{(s)}p^{(s)},\qquad z^{(s+1)}=t^{(s+1)}+\beta^{(s)}z^{(s)}.$$

Тут s — номер ітерації; y_0 — початкове наближення; $\widetilde{L}$ та $\widetilde{U}$ — компоненти неповного розкладу Холецького матриці A: $\widetilde{L}^{-1}\widetilde{U}^{-1}\approx E$.

Можливості розглянутого алгоритму досліджувалися на чисельному розв'язку модельних обернених задач з двома джерелами та шістьма пунктами спостереження. Розрахунки проводилися при таких параметрах моделі:

$$L_x=L_y=100,\qquad N_1=50,\qquad N_2=20,$$

$$K_1=K_2=50,\qquad \alpha=0,$$

$$\tau=0{,}1,\qquad T=50.$$

Початкове наближення для джерел обране нульовим. Дослідження проводилися при таких функціях джерел:

$$1)\ q_1(t) = \frac{t}{10}, \qquad q_2(t) = \frac{t}{20} \qquad \text{(рис. 2, 3)};$$

$$2)\ q_1(t) = \sin\left(\frac{t}{5}\right), \qquad q_2(t) = \sin\left(\frac{t}{7}\right) \qquad \text{(рис. 4, 5)}.$$

Результати чисельного моделювання ілюструють дуже високу точність обчислень [12], що гарантується запропонованим алгоритмом. Точні та наближені розв'язки майже збігаються, за виключенням випадку, коли $t \to T$. Крім того, значення функціоналу (3) дуже швидко спадає вже після 2–3 перших кроків (див. табл. 1, 2), і надалі значення залишається майже постійним та досить малим. Це є свідченням високої швидкості збіжності запропонованого методу.

5. Таким чином, в даній роботі доведено ефективність застосування об'єднаного варіаційного та лагранжово-ейлерового методу для розв'язання обернених задач ідентифікації джерел забруднення в грунтових водах. Цей метод характеризується високою швидкістю збіжності на перших ітераціях, простим та зручним у практичному використанні, досить точним (крім випадку $t \to T$). Тобто подальші дослідження повинні бути зосереджені на здоланні цього недоліку.

Таблиця 1. ($q_1(t) = t/10$, $q_2(t) = t/20$)

Номер ітерації	Значення функціоналу при $S = 2{,}6$ (S — параметр регуляризації)	Значення функціоналу при $S = 1{,}5$ (1, 2, 3 — ітерації); $S = 2{,}6$ (наступні ітерації)	Значення функціоналу при $S = 1{,}5$
1	167	167	167
2	95,8	1,02	1,02
3	55,2	0,696	0,696
10	1,19	0,0369	0,122
20	0,00513	0,000459	0,0108
30	0,0000271	0,00000831	0,000965
40	0,00000126	0,00000128	0,000089
50	0,000000494	0,000000546	0,0000102

Таблиця 2. ($q_1(t) = \sin(t/5)$, $q_2(t) = \sin(t/7)$)

Номер ітерації	Значення функціоналу при $S = 2{,}6$ (S — параметр регуляризації)	Значення функціоналу при $S = 1{,}5$ (1, 2, 3 — ітерації); $S = 2{,}6$ (наступні ітерації)	Значення функціоналу при $S = 1{,}5$
1	10	10	10
2	6,83	0,592	0,592
3	4,66	0,463	0,463
10	0,323	0,0187	0,0852
20	0,00727	0,000215	0,00765
30	0,000170	0,00000849	0,000710
40	0,00000543	0,00000212	0,0000763
50	0,00000747	0,00000775	0,0000131

1. *Самарский А. А., Вабищевич П. Н.* Разностные методы решения задач идентификации источника для параболических задач // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычислит. математика и кибернетика. – 1995. – № 1. – С. 47–56.
2. *Kabanikhin S. I.* Numerical analysis of inverse problems // J. of Inverse Ill-posed Probl. – 1995. – **3**, No 4. – P. 278–304.
3. *Ляшко С. И.* Обобщенное управление линейными системами. – Киев: Наук. думка, 1998. – 471 с.
4. *Lyashko S. I.* Generalized optimal control of linear systems with distributed parameters. – Dordrecht: Kluwer, 2002. – 466 c.
5. *Лукнер Л., Шестаков В. М.* Моделирование миграции подземных вод. – Москва: Недра, 1986. – 208 с.
6. *Konikov L. F., Mercer J. W.* Groundwater flow and transport modeling // J. Hydrol. – 1988. – **100**. – P. 379–409.
7. *Douglas J. Jr., Russel T. F.* Numerical methods for convection dominated diffussion problems based on combining the method of characteristics with element or finite difference procedures // SIAM J. Numer. Anal. – 1982. – **19**, No 5. – P. 871–885.
8. *Демченко В. Ф.* Разностные схемы для уравнений конвективной диффузии // Тр. Междунар. сов. “Моделирование в ядерной энергетике”. – Варна, 1982. – Ч. 1. – С. 24–29.
9. *Baptista A. M., Eric Adams E., Stolzenbach K. D.* Accuracy analysis of the backwards method of characteristics // Proc. of the 6-th Conf. On Finite Elements in Water Resour. (Lisbon, Portugal, June 1986). – Berlin: Springer, 1986. – P. 477–488.
10. *Ляшко С. И., Клюшин Д. А., Тригуб А. С.* Моделирование и оптимизация подземного массопереноса. – Киев: Наук. думка, 1998. – 471 с.
11. *Vinsome P. K. W.* Orthomin, an iterative method for solving sparse sets of simultaneous linear equations // Proc. 4th. Symp. on Reservoir Engineering, SPE of AIME. – Los Angeles, 1976. – P. 150–159.
12. *Lyashko S. I., Klyushin D. A., Semenov V. V., Shevchenko K. V.* Identification of point contamination source in ground water, modelling of evolving systems in ecology and economics // Internat. J. of Ecology and Development. – 2006. – **5**, № F06, FALL. – P. 36–43.

*Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка*

Надійшло до редакції 01.03.2007