

ЧИСЕЛЬНА ПРОЦЕДУРА ВІДТВОРЕННЯ НЕВІДОМИХ ПАРАМЕТРІВ ДЖЕРЕЛ ДЛЯ ЗАДАЧ МАСОПЕРЕНОСУ

Розглядається задача ідентифікації функції джерел для рівняння транспорту забруднень. Здійснено перехід до задачі оптимального керування для стаціонарного та нестаціонарного рівнянь з частинними похідними. Побудовано спряжені задачі. Для мінімізації відповідних функціоналів використовується градієнтний метод. Прямі та спряжені задачі на кожному кроці градієнтного методу розв'язуються різницевим методом. Наведені результати чисельних експериментів демонструють високу ефективність розробленого програмного забезпечення.

Вступ

Останнім часом виникає все більше проблем, пов'язаних з визначенням невідомих параметрів різноманітних джерел забруднення ґрунтових вод. Такі задачі виникають в системі моніторингу великих промислових об'єктів та місць поховання й збереження різноманітних відходів (включаючи радіоактивні), де, як правило, ведуться постійні спостереження за станом забрудненості ґрунтових вод. Спостереження можуть констатувати лише факт проникнення забруднень у ґрунтові води і, як правило, не дають можливості з'ясувати, де саме розташоване джерело забруднення та яка його потужність. Перспективним у вирішенні таких проблем може бути використання відповідного математичного та програмного забезпечення для розв'язування обернених задач, тобто задач, в яких необхідно відтворювати деякі параметри процесу при наявності інформації про розв'язок задачі. На цей час існує багато надійних методик для моделювання та прогнозування розповсюдження забруднень в ґрунтових водах. Крім того, накопичена значна кількість натурних даних для звалищ, золів, поховань відходів тощо. Тому необхідна розробка надійного програмного забезпечення для розв'язування обернених задач. У статті задача визначення невідомих функцій джерел при наявності інформації про рівні концентрації забруднень формулюється як задача оптимального керування для рівняння транспорту забруднень плановим потоком ґрунтових вод. Необхідною умовою успіху при розв'язуванні таких задач є наявність надійних методів та програмного забезпечення для моделювання та прогнозування транспорту забруднень в плані. Побудовано чисельний алгоритм розв'язування задачі оптимального керування, який ґрунтується на мінімізації відповідного функціоналу градієнтним

методом, на кожному кроці якого необхідно розв'язувати пряму та спряжену задачі.

1. Методологія

При моделюванні транспорту забруднень плановим потоком ґрунтових вод необхідно розв'язувати щонайменше систему рівнянь, яка складається з рівняння для визначення поля швидкостей потоку ґрунтових вод (рівняння Бусинеска) та рівняння, яке описує транспорт забруднень.

Розглянемо задачу відтворення функції джерела для рівняння конвективної дифузії по наявному полю концентрації. Концентрація забруднень $C(x_1, x_2, t)$ визначається з рівняння

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) - \sum_{i=1}^2 \frac{\partial (v_i C)}{\partial x_i} + U(x_1, x_2, t), \quad (1)$$

де $U(x_1, x_2, t)$ — функція джерел, яка підлягає визначенню, D — коефіцієнт дифузії, v_i — компоненти швидкості.

Будемо шукати розв'язок задачі в прямокутній області при $0 < t \leq T$. На відповідних ділянках границі області задаються, наприклад, умови

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x_1} \right|_{x_1=0} = \left. \frac{\partial C}{\partial x_1} \right|_{x_1=L_1} = 0, \quad (2)$$

$$D \left. \frac{\partial C}{\partial x_2} \right|_{x_2=0} = v_2 C, \quad C|_{x_2=L_2} = Q,$$

де Q — задана функція.

Початкова умова задається у вигляді

$$C(x, 0) = \varphi(x), \quad x \in \Omega. \quad (3)$$

В деякий момент часу T здійснено вимірювання поля концентрації в області. Вимірювання мо-

жуть бути зроблені в окремих точках і поширені на всю область.

Задача зводиться до пошуку мінімуму функціонала

$$J(U) = \int_0^{t_1} \int_0^{L_2} (C(x, T, U) - Z(x))^2 dx_1 dx_2, \quad (4)$$

де $Z(x)$ — задана в Ω функція (побудована на основі даних спостереження), U — функція керування, яка належить деякому гільбертовому простору H . Під розв'язком оберненої задачі будемо розуміти $C(x_1, x_2, t)$ та $U(x_1, x_2, t)$.

Для знаходження мінімуму функціонала будемо використовувати градієнтний метод [1].

Приріст функціонала (4) запишемо у вигляді

$$\Delta J(U) = J(U + h) - J(U) = \int_0^{t_1} \int_0^{L_2} 2(C(x, T, U) - Z(x)) \Delta C dx_1 dx_2 + \alpha(U, h)$$

де $\Delta C = C(x, t, U + h) - C(x, t, U)$, $h(x)$ — приріст керування, $\alpha(U, h)$ — нескінченно мала відносно $\|h\|_H \rightarrow 0$.

Для знаходження градієнта використовується спряжена [2] до (1) — (3) задача, де $\Psi(x_1, x_2, t)$ достатньо гладка функція.

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial T} = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^2 v_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i}, \quad (5)$$

$$\left(D \frac{\partial \Psi}{\partial x_1} + v_1 \Psi \right) \Big|_{x_1=0} = \left(D \frac{\partial \Psi}{\partial x_1} + v_1 \Psi \right) \Big|_{x_1=L_1} = 0, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0} = 0, \quad \Psi \Big|_{x_2=L_2} = 0, \quad 0 \leq t < T,$$

$$\Psi(x, T) = 2(C(x, T) - Z(x)), \quad x \in \Omega \quad (7)$$

Тоді градієнт функціонала має вигляд $J'(U) = \Psi(x, t)$.

Для розв'язування крайових задач (1) — (3) та (5) — (7) використовується один з варіантів чисельного методу характеристик, основні положення якого викладені в працях [3, 4]. Ідея методу характеристик полягає у введенні до рівняння субстанційної похідної (характеристичного напрямку), що виражає швидкість зміни концентрації в рухомій точці середовища. Далі проводиться розщеплення в процесі обчислень розрахунку конвекції і дифузії та розгляді кожного типу переносу окремо. Конвекція розраховується лагранжевим методом (методом слідування за частинкою), а дифузія — стандартним ейлеревим (на нерухомих сітках).

Запишемо рівняння (1) в лагранжевій формі:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} LC + U, \quad LC = \sum_{\alpha=1}^2 L_{\alpha} C,$$

$$L_{\alpha} C = \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(D \frac{\partial C}{\partial x_{\alpha}} \right), \quad \alpha = 1, 2, \quad (8)$$

де $\frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial t} + v_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial}{\partial x_2}$ — субстанційна похідна (характеристичний напрямок), що виражає швидкість зміни концентрації мігранта в рухомій точці. Рівняння траєкторій руху лагранжових координат $\tilde{x} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ представимо у вигляді:

$$\frac{\partial \tilde{x}_{\alpha}}{\partial \tau} = v_{\alpha}(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2), \quad \alpha = 1, 2. \quad (9)$$

Побудуємо в прямокутній області регулярну ейлереву сітку

$$\omega = \omega_h \times \omega_{\tau},$$

$$\omega_h = \left\{ x_{\alpha} = i_{\alpha} h_{\alpha}, i_{\alpha} = \overline{0, N_{\alpha}}, \alpha = 1, 2; h_{\alpha} = \frac{l_{\alpha}}{N_{\alpha}} \right\},$$

$$\omega_{\tau} = \{ t'' = n\tau, n = 0, 1, \dots, N, n\tau = T. \}$$

На кожному часовому відрізку будемо будувати лагранжеву сітку $\tilde{\omega}_{n\tau}$, яку узгодимо з регулярною ейлеревою сіткою таким чином, щоб в шуканий момент часу $t = t''$ їх вузли збігалися. Для знаходження ліній лагранжевої сітки використаємо рівняння траєкторій (9), проінтегрувавши їх при початковій умові

$$\tilde{x}_{\alpha i_{\alpha}}(t'') = x_{\alpha i_{\alpha}}, \quad i_{\alpha} = 1, \dots, N_{\alpha} - 1;$$

$$\tilde{x}_{\alpha i_{\alpha}}(t) = x_{\alpha i_{\alpha}} - V_{\alpha} \tau, \quad (10)$$

$$\tau = t'' - t, \quad t \in [t^{n-1}, t^n].$$

Апроксимуємо в рівнянні (8) субстанційну похідну на локальній лагранжевій сітці, а оператор LC — на дев'ятиточковому шаблоні регулярної ейлеревої сітки. Побудована у відповідності з модифікованим методом характеристик неявна різницева схема чисельного інтегрування двовимірного рівняння конвективної дифузії матиме вигляд:

$$\frac{C_i^n - I(C^{n-1}, \tilde{x}_{l_1}, \tilde{x}_{2l_2})}{\tau} = \Delta C^n + \varphi, \quad (11)$$

$$C|_{\Gamma} = C_{\Gamma}(\tilde{x}_{l_1}, \tilde{x}_{2l_2}, t), \quad (12)$$

$$C_{i=0} = C^0(x_{l_1}, x_{2l_2}), \quad (13)$$

де

$$\Delta C^n = \sum_{\alpha=1}^2 \Lambda_{\alpha} C^n,$$

$$\Lambda_{\alpha} C^n = \frac{1}{2} \left((DC_{\tilde{x}_{\alpha}})_{\tilde{x}_{\alpha}} + (DC_{\tilde{x}_{\alpha}})_{\tilde{x}_{\alpha}} \right), \alpha = 1, 2,$$

$I(C^{n-1}, \tilde{x}_{1i}, \tilde{x}_{2i})$ — значення інтерполяційного поліному, побудованого за значеннями C^{n-1} концентрації в момент часу t^{n-1} в точці простору $(\tilde{x}_{1i}, \tilde{x}_{2i})$, яка в момент часу t^n приходить у вузол сітки x_i . Для визначення значення I можна використати певну процедуру інтерполяції.

Наприклад, застосовуючи лінійну інтерполяцію і припускаючи, що точка лагранжевої сітки

$$\tilde{x}_i = (\tilde{x}_{1i}(t^{n-1}), \tilde{x}_{2i}(t^{n-1}))$$

потрапляє в комірку ейлерової сітки

$$G_i = \{x_{\alpha s_{\alpha}} \leq x_{\alpha} \leq x_{\alpha s_{\alpha}+1}, \alpha = 1, 2,$$

для визначення значення I використаємо співвідношення

$$I = \theta_{s_1 s_2}^1 (\theta_{s_1 s_2}^2 C_{s_1 s_2}^{n-1} + (1 - \theta_{s_1 s_2}^2) C_{s_1 s_2+1}^{n-1}) + \\ + (1 - \theta_{s_1 s_2}^1) (\theta_{s_1 s_2}^2 C_{s_1+1 s_2}^{n-1} + (1 - \theta_{s_1 s_2}^2) C_{s_1+1 s_2+1}^{n-1}),$$

$$\text{де } \theta_{s_1 s_2}^{\alpha} = \frac{1}{h_{\alpha}} (x_{\alpha s_{\alpha}+1} - \tilde{x}_{\alpha s_{\alpha}}), \quad 0 \leq \theta_{s_1 s_2}^{\alpha} \leq 1, \quad \alpha = 1, 2.$$

Наведена процедура інтерполяції є узагальненням інтерполяції, що застосовується при розв'язанні одновимірних рівнянь переносу.

Якщо лагранжева траєкторія виходить на одну з границь області фільтрації, то значення концентрації у відслідкованій точці визначається за допомогою граничних умов.

Після того, як знайдено розв'язки прямої та спряженої задач, нове керування знаходиться за градієнтним методом за формулою

$$U_{ij}^{k+s+1} = U_{ij}^{ks} - \lambda \Psi_{ij}^{ks}, \quad (14)$$

$$s = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad k = \overline{1, N_T - 1},$$

де i, j — змінюються по всіх внутрішніх вузлах сіткової області Ω_{h,h_j} , k — момент часу, $(N_T + 1)$ — кількість вузлів різницевої сітки в напрямку t , λ_s — кроковий множник, який вибирається з умови $|J(U^{s+1})| < |J(U^s)|$.

Критерієм зупинки ітераційного процесу (8) є виконання умови

$$\max_{i,j,k} |\Psi_{ij}^{ks}| < \varepsilon, \quad \varepsilon > 0.$$

У випадку, коли джерело забруднення діє достатньо довго (така ситуація є реальною в більшості задач), доцільно розглядати стаціонарне рівняння (1), яке записується у вигляді

$$\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) - \sum_{i=1}^2 \frac{\partial (v_i C)}{\partial x_i} = U(x). \quad (15)$$

До рівняння (15) додаються відповідні крайові умови.

Замість функціонала (4) розглядається функціонал

$$J(U) = \int_0^{L_1} \int_0^{L_2} (C(x, U) - Z(x))^2 dx_1 dx_2. \quad (16)$$

Спряжене рівняння записується у вигляді

$$\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right) + \sum_{i=1}^2 v_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} = -2(C(x) - Z(x)). \quad (17)$$

Для цієї задачі градієнт функціонала визначається формулою

$$J'(U) = \Psi(x).$$

Для знаходження мінімуму функціонала знову можемо використати градієнтний метод.

2. Результати розрахунків

Відповідно до сформульованих задач та розроблених алгоритмів створено програмне забезпечення та проведено чисельні розрахунки.

1. Не обмежуючи загальності, розглянемо одновимірне рівняння (1) з однорідними крайовими умовами першого роду та однорідною початковою умовою.

За тестовий було використано такий приклад. Спочатку розв'язується пряма задача для $0 \leq x \leq 2$, $T = 1$ при $D = 0,3$, $v = -1$. При чисельних розрахунках використовувалась 21 точка по x та 11 точок по t . Функція джерела була задана у вигляді $U(x, t) = 1$ при $0,2 \leq x \leq 0,3$, $U(x, t) = 0,5$ при $1,6 \leq x \leq 1,7$ і $U(x, t) = 0$ в усіх інших точках, $0 < t \leq 1$. Точний розв'язок задачі $C(x, T) = Z(x)$ наведено на рис. 1.

Далі, використовуючи $Z(x) = C(x, T)$ і приймаючи $U(x, t) = \phi(x, t)$, де $\phi(x, t)$ — довільне початкове керування (графік функції $\phi(x, t)$ наведено на рис. 3, а), була розв'язана обернена задача ($\varepsilon = 0,001$). На рис. 3, б наведено знайдене керування $U(x, t)$. Як видно з рис. 2 та 3, б функція джерела може бути відтворена з високою точністю.

Залишаючись в умовах попередньої задачі, розглянемо функцію $Z(x)$, яка містить похибки у вимірюванні (рис. 1). На рис. 2 наведено обчислену функцію $U(x, T)$. І в цьому випадку параметри одного джерела визначено досить точно, а параметри другого джерела визначаються з похибкою. Очевидно, що це обумовлено великою похибкою задання функції $Z(x)$.

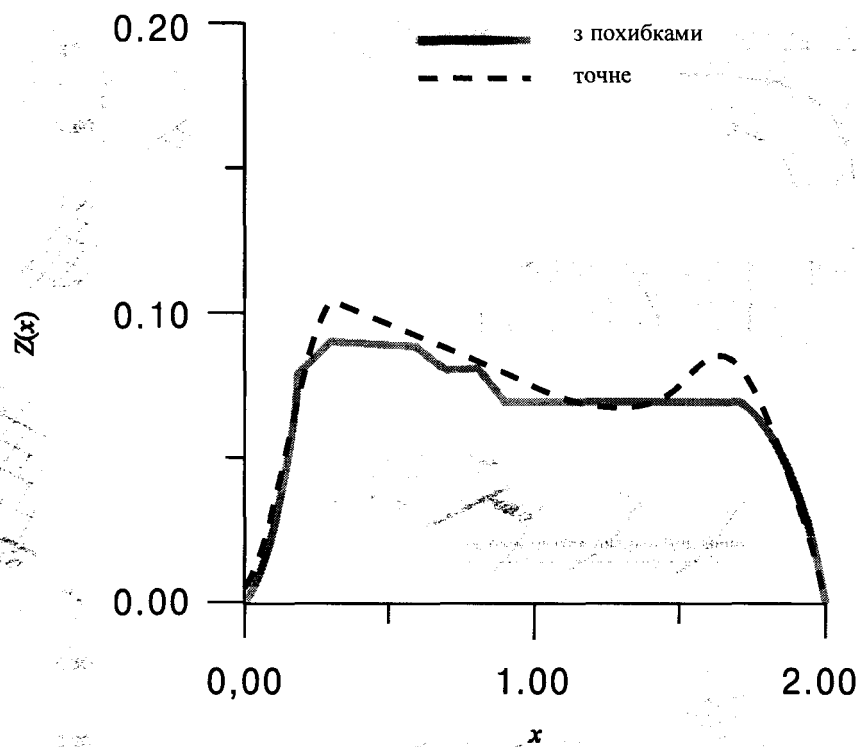


Рис. 1. Задана точно та з похибками концентрація забруднень в момент часу T

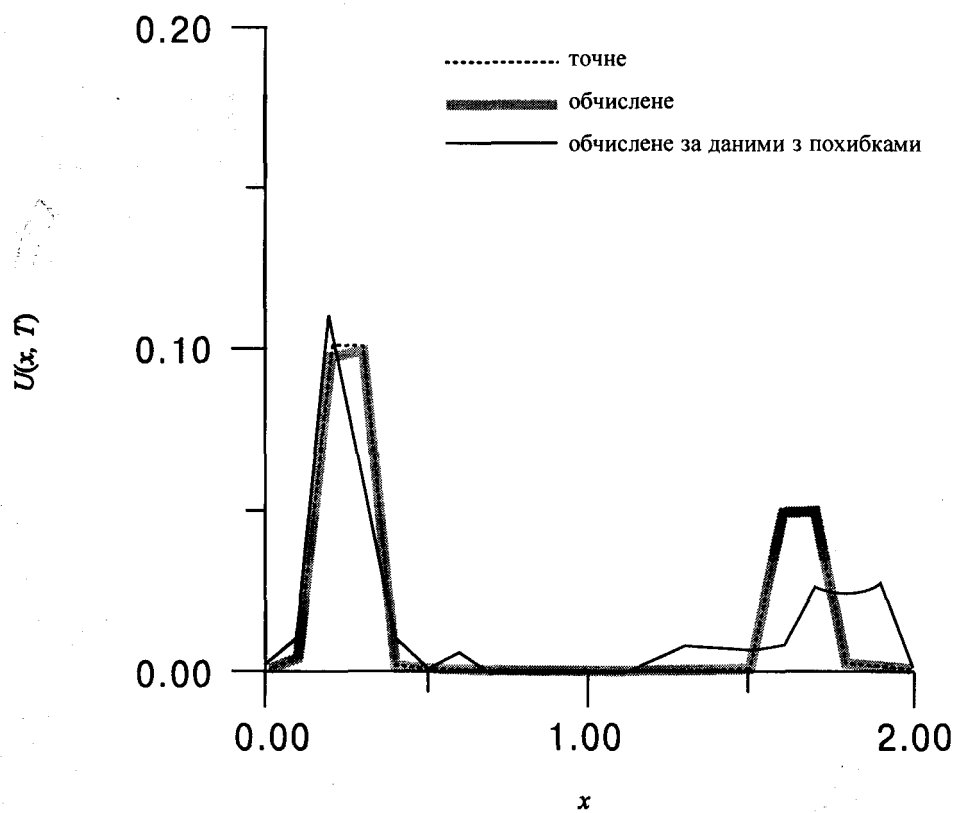
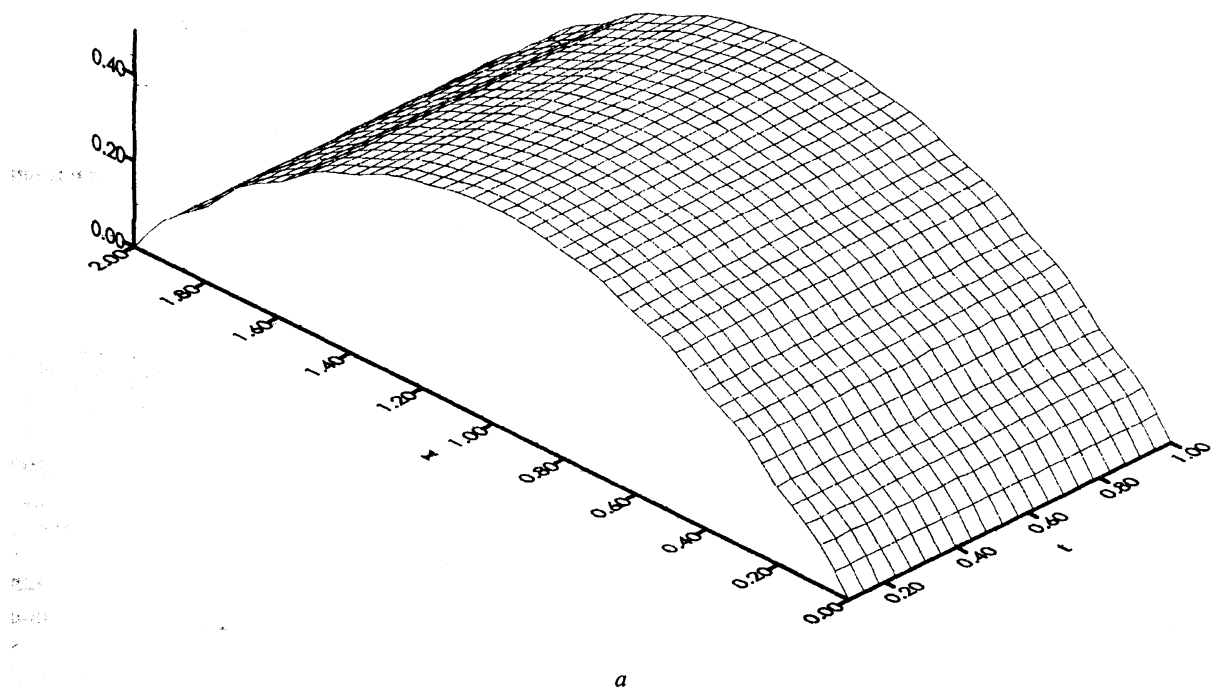
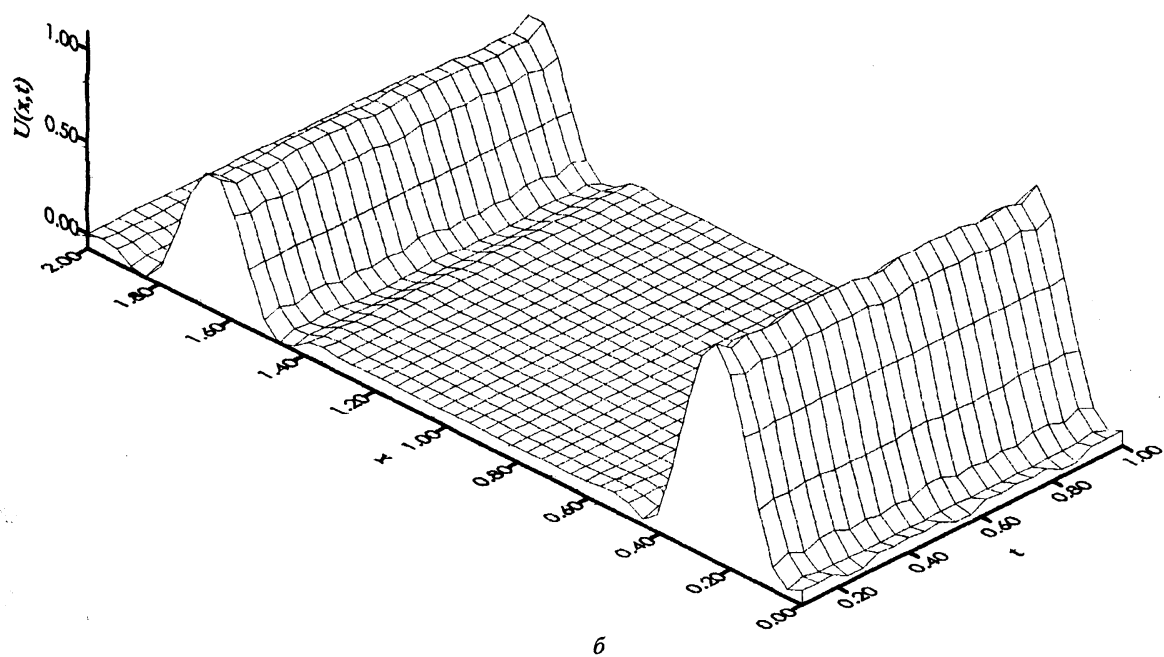


Рис. 2. Точне та обчислені значення керування в момент часу T

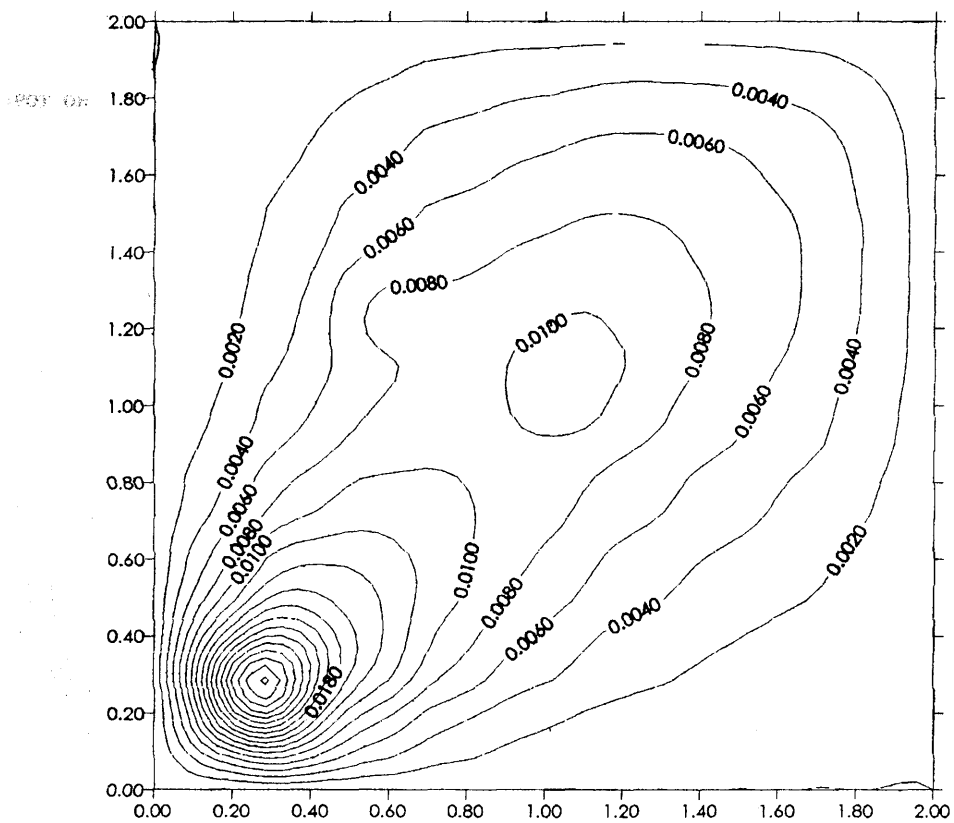


a

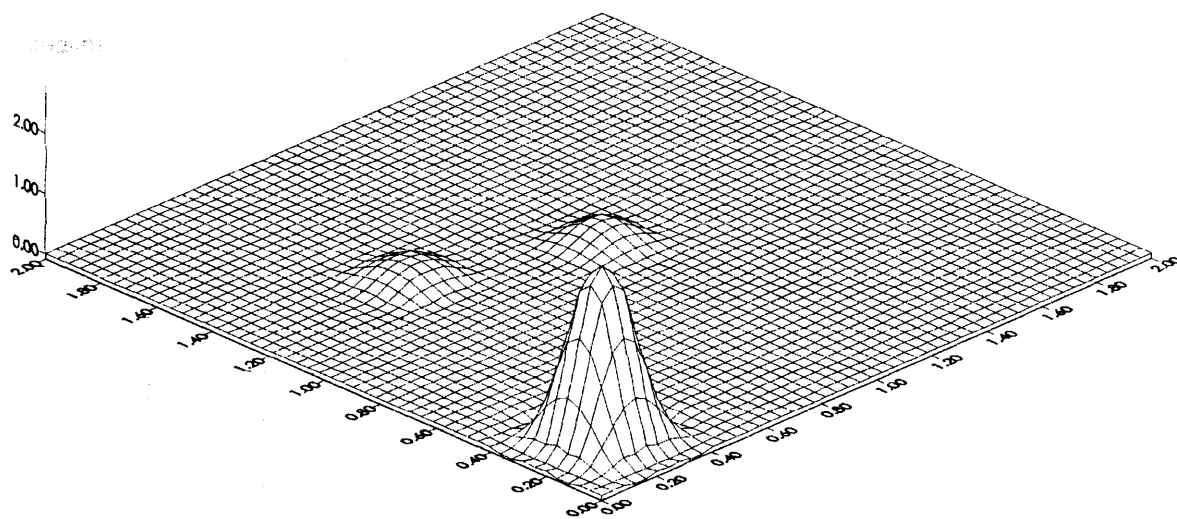


b

Рис. 3. Початкова (а) та знайдена (б) функція джерел



a



б

Рис. 4. Задане поле концентрації $Z(x)$ — а; знайдені джерела забруднення — б

2. Розглянемо обернену задачу для двовимірного стаціонарного рівняння транспорту (15). При чисельних розрахунках в області $\Omega = \{x = (x_1, x_2); 0 \leq x_1 \leq 2, 0 \leq x_2 \leq 2\}$ використовувалась рівномірна сітка 21×21 точок. У розрахунках коефіцієнт дифузії дорівнював $0,75$, $v_1 = v_2 = -3$

Розв'язувалась тестова задача з визначення невідомих параметрів (розташування та потужність) трьох джерел забруднення, розташованих у середині області. Джерела були підібрані таким чином, що одне з них було значно потужнішим за інші і маскувало їх дію. Функція $Z(x)$ наведена на рис. 4, а. Як і в попередній задачі, спочатку розв'язувалась пряма задача з відомою функцією джерел, а потім

за знайденим розв'язком задачі відтворювались вже невідомі параметри джерел. На рис. 4, б наведено обчислену функцію $U(x)$. У цій задачі розроблена методика дозволяє практично точно знайти невідомі параметри джерел.

3. Висновки

Розроблене математичне та програмне забезпечення для визначення невідомих параметрів джерел забруднення ґрунтових вод було апробовано на ряді тестових задач. Результати моделювання свідчать про високу точність та надійність розробленої методики і можуть бути використані для розв'язання реальних екологічних проблем.

1. Васильев Ф. П. Численные методы решения экстремальных задач.— М.: Наука, 1980.— 518 с.
2. Ляшко С. /., Потапенко Л. /., Пришляк К. О., Стеля О. Б. Оптимальное керування в задачах масопереносу // Волинський математичний вісник.— Рівне, 1998.— Вип. 5.— С. 97—100.
3. Douglas J. Jr., Russel T. F. Numerical methods for convection dominated diffusion problems based on combining the method

of characteristics with finite element or finite difference procedures//SIAM J. Numer. Anal.— 1982.—№ 5.— P. 871—885.

4. Демченко В. Ф. Разностные схемы для уравнения конвективной диффузии // Тр. Международн. Совещания "Моделирование в ядерной энергетике".— Варна, 1982.— Ч. 1.— С. 24—49.

Stelya O. B., Trigub O. S.

THE NUMERICAL PROCEDURE FOR RESTORING UNKNOWN PARAMETERS OF SOURCES FOR THE MASS-TRANSPORT PROBLEM

The problem of identifying source function for equation of pollution transport is regarded. The transition to the problem of optimal control for stationary and non-stationary equations with partial derivatives is carried out. The adjoint problems are constructed. For minimizing correspondent functional, the gradient method is applied. The difference method is used for solving the direct and the adjoint problem on the each step of the gradient method. The experimental results, which show the high effectiveness of the developed software, are given.