ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 3, с. 451–461

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.6

ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ ГРАНИЧНОГО УСЛОВИЯ В ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТИПА РЕАКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ-АДВЕКЦИЯ С ДАННЫМИ О ПОЛОЖЕНИИ ФРОНТА РЕАКЦИИ[1)]

Р. Л. Аргун[1], А. В. Горбачев[1], Д. В. Лукьяненко[1,2,*], М. А. Шишленин[3,4]

[1] 119992 Москва, Ленинские горы, 1, МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики, Россия

[2] 119234 Москва, Ленинские горы, 1, Московский центр фундаментальной и прикладной математики, Россия

[3] 630090 Новосибирск, пр-т Акад. Лаврентьева, 6, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Россия

[4] 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1, Новосибирский государственный университет, Россия

*e-mail: lukyanenko@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 31.03.2021 г.
Переработанный вариант 08.04.2021 г.
Принята к публикации 20.05.2021 г.

Предлагается новый подход к восстановлению граничного условия в обратной задаче для нелинейного сингулярно возмущенного уравнения типа реакция-диффузия-адвекция с данными о положении фронта реакции. Для решения задачи используется градиентный метод минимизации целевого функционала с выбором начального приближения, поиск которого основан на применении методов асимптотического анализа. Численные эксперименты демонстрируют эффективность предложенного подхода. Библ. 55. Фиг. 5.

Ключевые слова: обратная задача с данными о положении фронта реакции, обратная краевая задача, уравнение типа реакция-диффузия-адвекция.

DOI: 10.31857/S0044466922030024

1. ВВЕДЕНИЕ

В статье рассматриваются особенности численного восстановления граничного условия в обратной задаче для нелинейного сингулярно возмущенного уравнения типа реакция-диффузия-адвекция. В качестве данных обратной задачи используется информация о динамике движения фронта реакции. Задачи для уравнений такого типа возникают в газовой динамике [1], химической кинетике [2]–[8], нелинейной теории волн [9], биофизике [10]–[14], медицине [15]–[18], экологии [19]–[22], финансовой математике [23] и других областях науки [24]. Если в задачах присутствуют разномасштабные процессы, то математические модели таких задач содержат нелинейные параболические уравнения с малыми параметрами при некоторых производных. Как следствие, решения этих задач могут содержать узкие пограничные и/или внутренние слои (стационарные и/или движущиеся фронты).

Часто в постановках обратных задач для уравнений в частных производных используют дополнительную информацию о решении на части границы области (см., например, [25]–[34]). В частности, в работах [35], [36] были рассмотрены особенности численного решения обратных задач для уравнений типа реакция-диффузия-адвекция с данными в финальный момент времени. Однако одной из возможных постановок обратных задач для уравнений такого типа является постановка с дополнительной информацией о динамике движения фронта реакции (см., например, [37]–[39]), который наиболее естественно наблюдать в эксперименте – положение фронта ударной волны, фронта реакции или горения являются легкоразличимыми контрастными структурами.

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 20-31-70016).

Данная работа является продолжением работы [40]. В работе [40] был рассмотрен вопрос о возможности применения методов асимптотического анализа для восстановления граничного условия в обратной задаче для нелинейного сингулярно возмущенного уравнения типа реакция-диффузия-адвекция с данными о положении фронта реакции. В указанной работе была использована важная особенность применения методов асимптотического анализа к исследованию нелинейных дифференциальных уравнений с малыми параметрами при старших производных, которая заключается в том, что асимптотический анализ при определенных условиях позволяет свести исходную задачу для нелинейного сингулярно возмущенного уравнения в частных производных к гораздо более простой задаче. Такая задача не содержит малых параметров и имеет меньшую размерность (а иногда и вовсе содержит не дифференциальные, а алгебраические уравнения). В результате применения такого подхода в [40] была получена редуцированная постановка обратной задачи, которая связала явным образом граничное условие, которое необходимо восстановить при решении обратной задачи, с положением движущегося фронта реакции, информация о движении которого наблюдается экспериментально. Было показано, что в случае достаточно малых значений "малого параметра", входящего в исходное уравнение в частных производных, редуцированная постановка дает решение, близкое к решению обратной задачи в полной постановке. Однако по итогам указанной работы остался открытым вопрос о том, как быть в случае, когда значение "малого параметра" не является достаточно малым. При решении реальных прикладных задач зачастую заранее не известно, можно ли считать "малый параметр", используемый в постановке задачи, достаточно малым для применения подходов из [40]. Может ли решение, полученное методами из [40], быть уточнено? Другими словами, может ли полученное методами асимптотического анализа приближение решения быть использовано в качестве хорошего начального приближения решения с последующим его уточнением градиентным методом минимизации целевого функционала при решении обратной задачи в полной постановке? Ответу на этот вопрос и посвящена данная работа.

Структура данной работы следующая. В разд. 2 приводится постановка обратной задачи, рассмотренная в работе [40], и итоговый результат из той же работы. Демонстрируется пример для случая не достаточно малого значения "малого параметра", при котором подход, предложенный в работе [40], не дает удовлетворительного результата. В разд. 3 приводится видоизмененная постановка обратной задачи, позволяющая применить метод решения, основанный на минимизациии целевого функционала с помощью градиентного метода. В качестве начального приближения в градиентном методе используется информация о решении, полученная методами асимптотического анализа. Демонстрируются результаты численных расчетов, подтверждающие эффективность предложенного подхода.

2. ПОСТАНОВКА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ И МЕТОД ЕЕ РЕШЕНИЯ, ОСНОВАННЫЙ НА ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДОВ АСИМПТОТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

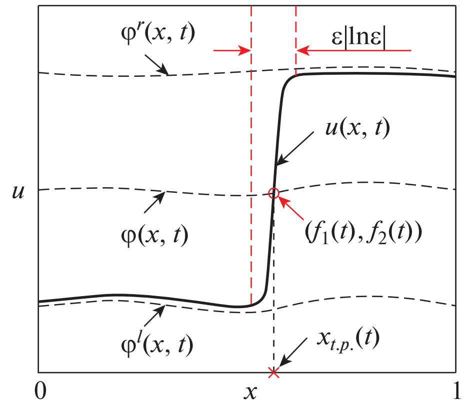
Рассмотрим прямую задачу для сингулярно возмущенного уравнения типа реакция-диффузия-адвекция

$$
\begin{gathered}
\varepsilon\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-\frac{\partial u}{\partial t}\right)=A(u,x,t)\frac{\partial u}{\partial x}+B(u,x,t),\quad x\in(0,1),\quad t\in\mathbb{R}^1,\\
u(0,t)=u_{\mathrm{left}}(t),\quad u(1,t)=u_{\mathrm{right}}(t)\equiv q(t),\quad t\in\mathbb{R}^1,\\
u(x,t)=u(x,t+T),\quad x\in(0,1),\quad t\in\mathbb{R}^1,
\end{gathered}
\tag{1}
$$

где $0<\varepsilon<1$ – "малый параметр", а функции $A(u,x,t)$, $B(u,x,t)$, $u_{\mathrm{left}}(t)$ и $q(t)$ являются достаточно гладкими.

Известно [40], что при определенных условиях задача (1) имеет решение в виде движущегося фронта, т.е. решение задачи близко к двум различным функциям $\varphi^l(x,t)$ и $\varphi^r(x,t)$ слева и справа от некоторой точки $x_{\mathrm{t.p}}(t)$, а в малой (порядка $\varepsilon|\ln\varepsilon|$) окрестности этой точки наблюдается узкий внутренний переходный слой (см. фиг. 1). Функция $x=x_{\mathrm{t.p}}(t)$, описывающая положение фронта реакции, может быть найдена как решение, например, следующего функционального уравнения [40]:

$$
u(x,t)=\varphi(x,t)\equiv\frac{1}{2}(\varphi^l(x,t)+\varphi^r(x,t)),\quad t\in\mathbb{R}^1.
$$



Фиг. 1. Типичный вид решения типа движущегося фронта в задаче (1) в фиксированный момент времени t.

Таким образом, мы можем сопоставить граничному условию $q(t)$ задачи (1), имеющей решение типа движущегося фронта, положение этого фронта реакции $x_{\text{t.p}}(t) \equiv f_1(t)$ в любой момент времени $t \in \mathbb{R}^1$ (см. фиг. 1).

Обратная задача, сформулированная в [40], состояла в определении граничного условия $q(t)$, $t \in [0, T]$, в (1) по известной дополнительной информации о положении фронта реакции

$$x_{\text{t.p}}(t) = f_1(t), \quad t \in [0, T]. \tag{2}$$

Отметим, что на практике вместо точных данных $f_1(t)$ известны их приближенные значения $f_{1\delta_1}(t)$, измеренные экспериментально, такие что

$$\left\| f_1 - f_{1\delta_1} \right\|_{L_2} \le \delta_1.$$

Результатом работы [40] явилась редуцированная постановка обратной задачи (1), (2) в предположении достаточной малости “малого параметра” ε:

$$\int\limits_{\varphi^l(f_1(t),t)}^{\varphi^r(f_1(t),t)} A(u, f_1(t), t)du = 0, \quad t \in [0, T], \tag{3}$$

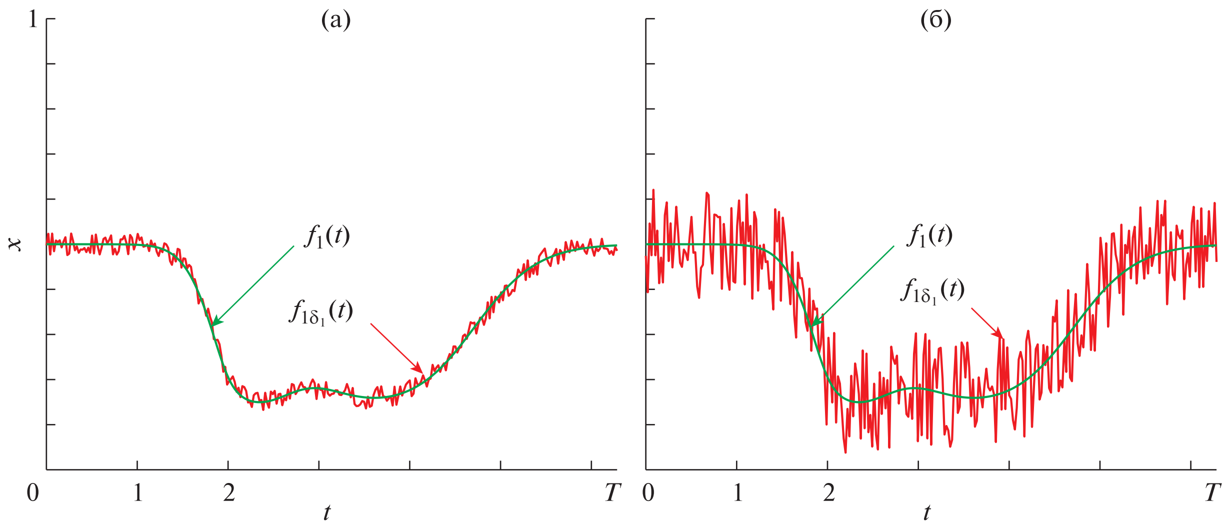
где функции $\varphi^l(x,t)$ и $\varphi^r(x,t)$ определяются как решения задач

$$\begin{gathered} A(\varphi^l, x, t)\frac{d\varphi^l}{dx} + B(\varphi^l, x, t) = 0, \quad x \in (0, 1], \\ \varphi^l(0, t) = u_{\text{left}}(t), \end{gathered} \tag{4}$$

и

$$\begin{gathered} A(\varphi^r, x, t)\frac{d\varphi^r}{dx} + B(\varphi^r, x, t) = 0, \quad x \in [0, 1), \\ \varphi^r(1, t) = q(t). \end{gathered} \tag{5}$$

Таким образом, в [40] была получена более простая связь между искомой функцией $q(t)$ и данными обратной задачи, определяющими положение фронта реакции $f_1(t)$. Обратная задача (1), (2) для уравнения в частных производных была заменена обратной задачей для алгебраического относительно восстанавливаемого коэффициента $q(t)$ уравнения (3) и двух обыкновенных дифференциальных уравнений (4) и (5) относительно функций $\varphi^l(x,t)$ и $\varphi^r(x,t)$, которые входят в уравнение (3). Отметим, что редуцированная постановка задачи не содержит “малого параметра”. При этом в [40] было показано, что решение задачи в такой редуцированной постановке дает достаточно точное качественное и количественное описание истинного решения обратной задачи при достаточно малых значениях параметра ε.



Фиг. 2. Точная модельная функция $f_1(t)$ и зашумленная функция $f_{1\delta_1}(t)$, симулированные для набора модельных параметров (6) с ошибкой $\delta_1 = 1.2\times10^{-3}$ (а) и $\delta_1 = 3.2\times10^{-2}$ (б), что соответствует уровню относительных ошибок ~ 5 и ~ 20% соответственно.

2.1. Пример численных расчетов в случае "неудачных" параметров задачи

Рассмотрим эффективность работы предложенного в [40] алгоритма, основанного на численном поиске решения редуцированной постановки задачи (3)–(5), на примере решения обратной задачи (1), (2) для следующего набора модельных параметров:

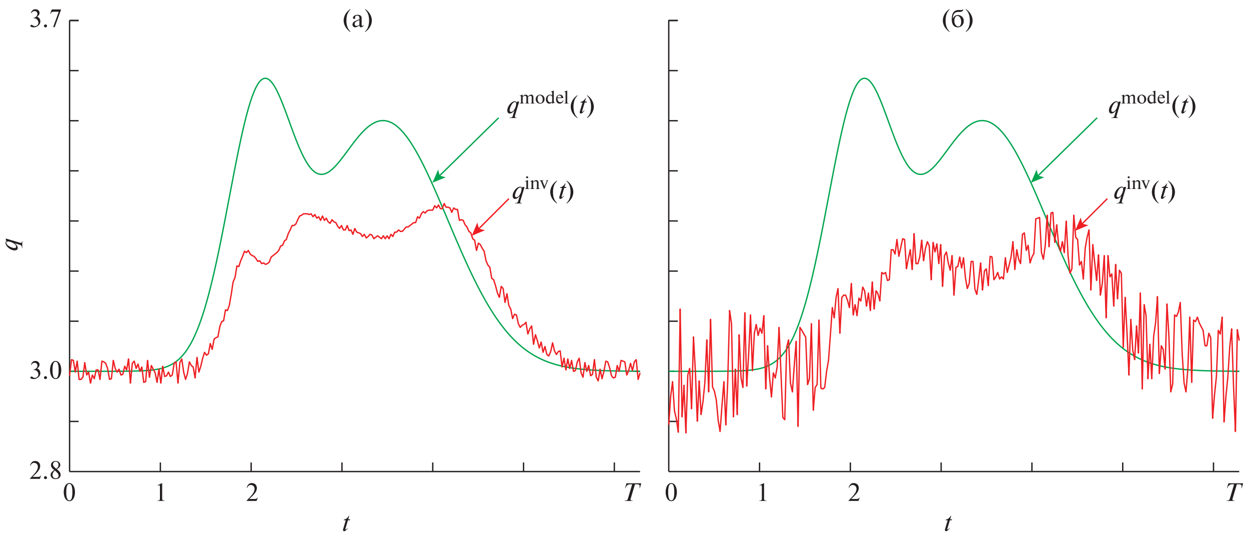
$$\varepsilon = 10^{-1.5}, \quad A(u,x,t) = -u, \quad B(u,x,t) = u, \quad T = 2\pi,$$
$$u_{\text{left}}(t) = -3 + 0.5e^{-4\left(t-\frac{2\pi}{3}\right)^2} + 0.5e^{-(t-1.1\pi)^2}, \tag{6}$$
$$q(t) \equiv q^{\text{model}}(t) = 3 + 0.5e^{-4\left(t-\frac{2\pi}{3}\right)^2} + 0.5e^{-(t-1.1\pi)^2}.$$

Для указанного набора модельных параметров с помощью решения задачи в полной постановке была симулирована функция $f_1(t)$, которая затем была зашумлена с некоторой ошибкой δ_1 (см. фиг. 2). Алгоритм симуляции входных данных $f_{1\delta_1}(t)$ подробно описан в работе [40]. Полученная функция $f_{1\delta_1}(t)$ была использована в алгоритме (описан в [40]), реализующем поиск функции $q^{\text{inv}}(t) \equiv q(t)$, $t \in [0,T]$, удовлетворяющей системе (3)–(5) при $f_1 := f_{1\delta_1}$.

На фиг. 3 представлен результат восстановления функции $q(t)$ по симулированным данным $f_{1\delta_1}(t)$, заданными с относительными ошибками на уровне 5 и 20%. Из результатов расчетов видно, что восстановленная функция $q^{\text{inv}}(t)$ достаточно сильно отличается от модельного решения $q^{\text{model}}(t)$ как количественно, так и качественно (например, на левом рисунке количество явно различимых локальных экстремумов функций $q^{\text{model}}(t)$ и $q^{\text{inv}}(t)$ различно). Это связано с тем, что "малый параметр" ε в случае рассматриваемой задачи для набора параметров (6) не удовлетворяет условиям применимости алгоритма решения, предложенного в [40]. Однако полученное с помощью этого алгоритма решение возможно использовать в качестве хорошего начального приближения при реализации градиентного метода минимизации целевого функционала при решении задачи в полной постановке.

3. ВИДОИЗМЕНЕННАЯ ПОСТАНОВКА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ И МЕТОД ЕЕ РЕШЕНИЯ, ОСНОВАННЫЙ НА МИНИМИЗАЦИИ ЦЕЛЕВОГО ФУНКЦИОНАЛА

Рассмотрим ситуацию, в которой значение "малого параметра" ε в задаче (1) не удовлетворяет условиям применимости методов асимптотического анализа [41] и не позволяет искать реше-



Фиг. 3. Точное модельное решение (функция $q^{\text{model}}(t)$) и результат его восстановления (функция $q^{\text{inv}}(t)$) по входным данным обратной задачи, определенных функцией $f_{1\delta_1}(t)$, симулированной для набора модельных параметров (6) с ошибкой $\delta_1 = 1.2\times10^{-3}$ (а) и $\delta_1 = 3.2\times10^{-2}$ (б).

ние обратной задачи (1), (2) в виде решения редуцированной постановки задачи (3)–(5). В этом случае видоизменим рассмотренную в [40] постановку обратной задачи следующим образом. Кроме входной информации о положении фронта реакции потребуем наличие и информации о значении функции u на кривой, определяемой траекторией движения фронта. Эта дополнительная информация дает возможность свести решение обратной задачи в полной постановке к поиску решения градиентным методом минимизации целевого функционала. Таким образом, обратная задача с уточненными входными данными может быть сформулирована следующим образом.

Обратная задача состоит в определении граничного условия $q(t)$, $t\in[0,T]$, в (1) по известной дополнительной информации о положении фронта реакции и значении функции u на этом положении фронта (см. фиг. 1)

$$x_{\text{t.p}}(t) = f_1(t),\quad u(x_{\text{t.p}}(t),t) = f_2(t),\quad t\in[0,T]. \tag{7}$$

Отметим, что на практике вместо точных данных $f_1(t)$ и $f_2(t)$ известны их приближенные значения $f_{1\delta_1}$ и $f_{2\delta_2}$, такие что

$$\left\|f_1 - f_{1\delta_1}\right\|_{L_2} \le \delta_1,\quad \left\|f_2 - f_{2\delta_2}\right\|_{L_2} \le \delta_2.$$

Замечание. Отметим, что априорно известно, что $\delta_2 \le \left\|\varphi^r(x,t) - \varphi^l(x,t)\right\|_{L_2}$ (см. фиг. 1).

Решение обратной задачи (1), (7) может быть найдено как элемент $q^{\text{inv}}(t)$, реализующий минимум функционала А.Н. Тихонова [42]

$$J[q] = \int_0^T (u(f_1(t),t;q) - f_2(t))^2 dt + \alpha\Omega[q]. \tag{8}$$

Здесь $\Omega[q]$ – сглаживающий функционал. В данной работе мы используем $\Omega[q] \equiv \|q\|^2_{W_2^1}$:

$$\Omega[q] = \int_0^T (q^2(t) + q'^2(t))dt.$$

Также в (8): $u(x,t;q)$ – решение прямой задачи (1) для заданной функции $q(t)$, α – параметр регуляризации, который может быть выбран, например, по обобщенному принципу невязки [42].

Замечание. В численных экспериментах можно положить $\alpha = 0$ и использовать номер итерации s как параметр регуляризации [43], [29]. Такой подход будет эквивалентен использованию сглаживающего функционала вида $\Omega[q] \equiv \|q\|^2_{L_2}$.

3.1. Алгоритм численного решения обратной задачи (1), (7)

Шаг 1. Зададим $s := 0$ и $q^{(0)}(t)$, $t \in [0,T]$, в качестве начального приближения.

Шаг 2. Найдем решение $g^{(s)}(x)$ вспомогательной стационарной задачи:

$$\begin{gathered}\varepsilon\frac{d^2g^{(s)}(x)}{dx^2} = A(g^{(s)}(x),x,0)\frac{dg^{(s)}(x)}{dx} + B(g^{(s)}(x),x,0), \quad x \in (0,1),\\ g^{(s)}(0) = u_{\text{left}}(t)\big|_{t=0}, \quad g^{(s)}(1) = q^{(s)}(0).\end{gathered} \tag{9}$$

Шаг 3. Найдем решение $u^{(s)}(x,t)$ прямой задачи:

$$\begin{gathered}\varepsilon\left(\frac{\partial^2u^{(s)}}{\partial x^2} - \frac{\partial u^{(s)}}{\partial t}\right) = A(u^{(s)},x,t)\frac{\partial u^{(s)}}{\partial x} + B(u^{(s)},x,t), \quad x \in (0,1), \quad t \in (0,T],\\ u^{(s)}(0,t) = u_{\text{left}}(t), \quad u^{(s)}(1,t) = q^{(s)}(t), \quad t \in (0,T],\\ u^{(s)}(x,0) = g^{(s)}(x), \quad x \in [0,1].\end{gathered}$$

Шаг 4. Найдем решение $\psi^{(s)}(x,t)$ сопряженной задачи:

$$\begin{gathered}\varepsilon\frac{\partial^2\psi^{(s)}}{\partial x^2} + \varepsilon\frac{\partial\psi^{(s)}}{\partial t} + (A(u^{(s)},x,t)\psi^{(s)})_x - (A_u(u^{(s)},x,t)\frac{\partial u^{(s)}}{\partial x} + B_u(u^{(s)},x,t))\psi^{(s)} +\\ + 2\delta(x - f_1(t))(u^{(s)}(x,t) - f_2(t)) = 0, \quad x \in (0,1), \quad t \in [0,T),\\ \psi^{(s)}(0,t) = 0, \quad \psi^{(s)}(1,t) = 0, \quad t \in [0,T), \quad \psi^{(s)}(x,T) = 0, \quad x \in [0,1].\end{gathered} \tag{10}$$

Здесь $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака.

Шаг 5. Найдем решение $w^{(s)}(x)$ вспомогательной стационарной задачи

$$\begin{gathered}\varepsilon\psi^{(s)}(x,0) + \varepsilon\frac{d^2w^{(s)}}{dx^2} + (A(g^{(s)}(x),x,0)w^{(s)})_x -\\ - (A_u(g^{(s)}(x),x,0)\frac{dg^{(s)}(x)}{dx} + B_u(g^{(s)}(x),x,0))w^{(s)} = 0, \quad x \in (0,1),\\ w^{(s)}(0) = 0, \quad w^{(s)}(1) = 0.\end{gathered} \tag{11}$$

Шаг 6. Найдем градиент функционала (8):

$$J'[q^{(s)}](t) = \begin{cases}-\varepsilon\dfrac{dw^{(s)}}{dx}(1) + \alpha\Omega'[q^{(s)}](t) & \text{для} \quad t = 0,\\ -\varepsilon\dfrac{\partial\psi^{(s)}}{\partial x}(1,t) + \alpha\Omega'[q^{(s)}](t) & \text{для} \quad t \in (0,T].\end{cases}$$

Производная $\Omega'[q^{(s)}](t)$ сглаживающего функционала может быть вычислена либо аналитически, либо численно.

Шаг 7. Найдем приближенное решение на следующем шаге итерации:

$$q^{(s+1)}(t) = q^{(s)}(t) - \beta_s J'[q^{(s)}](t),$$

где β_s – параметр спуска.

Шаг 8. Проверим условие остановки итерационного процесса. Если оно выполняется, положим $q^{\text{inv}}(t) := q^{(s+1)}(t)$ решением обратной задачи. В противном случае, зададим $s := s + 1$ и перейдем к ш. 2.

(а) В случае данных, измеренных в эксперименте с ошибками δ_1 и δ_2, критерий остановки:

$$\int_0^T [(x_{\text{t.p}}(t; q^{(s+1)}(t)) - f_{1\delta_1}(t))^2 dt + (u(f_{1\delta_1}(t), t; q^{(s+1)}(t)) - f_{2\delta_2}(t))^2] dt \leq \delta_1^2 + \delta_2^2.$$

Здесь $x_{\text{t.p}}(t; q)$ — положение фронта реакции, определяемого при решении прямой задачи (1) для заданной функции $q(t)$.

(б) В случае точных входных данных итерационный процесс останавливается, когда $J[q^{(s)}]$ меньше оценки ошибки конечно-разностной аппроксимации.

Наличие априорной информации об искомом решении позволяет существенно снизить число итераций при реализации алгоритма [44]. В качестве такой априорной информации будем использовать функцию $q^{(0)}(t)$, полученную как решение обратной задачи в редуцированной постановке (3)–(5).

3.2. Примеры численных расчетов

Рассмотрим эффективность работы предложенного алгоритма, основанного на минимизации целевого функционала (8), на примере решения обратной задачи (1), (7) для модельного набора параметров (6) и функции $f_{1\delta_1}(t)$, заданной с таким же уровнем шума, как и в примере разд. 2 (см. фиг. 2). В качестве начального приближения $q^{(0)}(t)$ будем использовать решение задачи в редуцированной постановке (3)–(5).

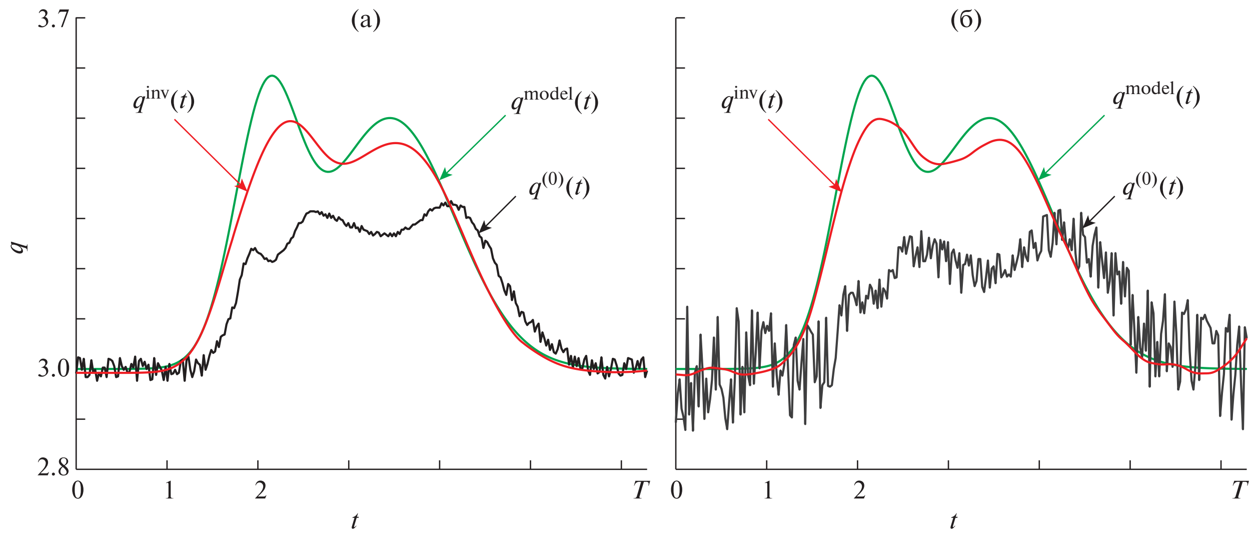
Для решения прямой задачи (1) (ш. 3 алгоритма) и сопряженной задачи (10) (ш. 4 алгоритма) использовался жесткий метод прямых SMOL [45], позволяющий свести систему для уравнения в частных производных к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Полученные системы дифференциальных уравнений решались с помощью одностадийной схемы Розенброка с комплексным коэффициентом CROS1 [46], [47]. Подробное описание деталей численного решения подобных задач может быть найдено, например, в [35], [40]. В частности, в [35] описывается построение соответствующих численных схем с использованием динамически адаптированных сеток. Вспомогательные стационарные задачи (9) и (11) (ш. 2 и ш. 5 алгоритма) решались методом счета на установление. При реализации градиентного метода использовались сетки с $N = 300$ и $M = 300$ интервалами по пространственной и временной переменным соответственно, параметр спуска $\beta_s = 5\times10^{-6}$, параметр регуляризации $\alpha = 20$. При решении сопряженной задачи (10) (ш. 3 алгоритма) использовалась следующая формула для аппроксимации δ-функции [48]:

$$\delta(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\omega}\left(1 + \cos\left(\dfrac{\pi x}{\omega}\right)\right), & \left|\dfrac{x}{\omega}\right| \leq 1, \\ 0, & \left|\dfrac{x}{\omega}\right| > 1, \end{cases}$$

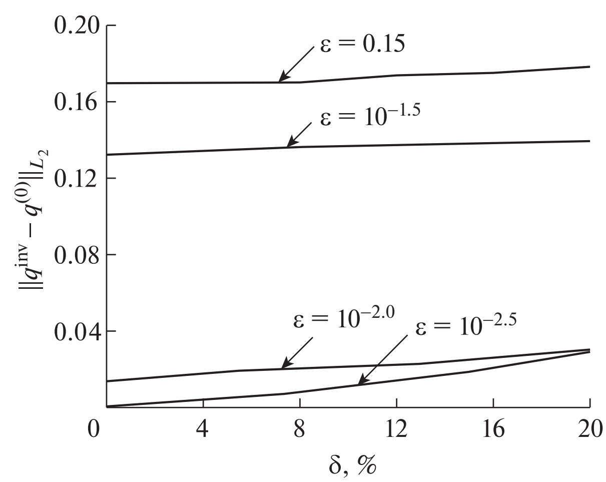
с размером носителя дискретной δ-функции: $\omega = 10^{-2}$. Для вычисления интеграла (ш. 8 алгоритма) использовалась формула трапеций.

На фиг. 4 представлен результат восстановления функции $q^{\text{inv}}(x)$ в случае старта с “хорошего” начального приближения $q^{(0)}(t)$. Полученное решение качественно и количественно уже не сильно отличается от истинного, особенно с учетом того, что оно было восстановлено по данным $f_{1\delta_1}(t)$, заданным с ошибками.

Далее проведем набор расчетов для модельного набора параметров (6), но для различных значений ε и разного уровня погрешности задания входных данных δ_1. В связи с тем, что численные эксперименты продемонстрировали малую чувствительность алгоритма к ошибкам δ_2 функции $f_{2\delta_2}(t)$, во всех экспериментах мы используем $\delta_2 = 0$. На фиг. 4 представлена зависимость



Фиг. 4. Результат восстановления функции $q^{\text{inv}}(x)$ с помощью градиентного метода минимизации целевого функционала (8). В качестве входных данных обратной задачи использовались функции $f_{1\delta_1}(t)$ и $f_{2\delta_2}(t)$, симулированные для набора модельных параметров (6) с ошибками $\{\delta_1, \delta_2\} = \{1.2 \times 10^{-3}, 0\}$ (а) и $\{\delta_1, \delta_2\} = \{3.2 \times 10^{-2}, 0\}$ (б). Старт градиентного метода осуществлялся с "хорошего" начального приближения $q^{(0)}(t)$ (совпадающего в случае выбранных ошибок с изображенными на фиг. 2).



Фиг. 5. Зависимость $\left\|q^{\text{inv}} - q^{(0)}\right\|_{L_2}$ от погрешности δ_1 задания входных данных $f_{1\delta_1}$ для различных значений малого параметра ε.

$\left\|q^{\text{inv}}(t) - q^{(0)}(t)\right\|_{L_2}$ от относительной погрешности задания входных данных, определяемой по формуле $\delta_1/\|f_1\| \times 100\%$, для различных значений ε. Здесь функция $q^{(0)}(t)$ является решением задачи в редуцированной постановке (3)–(5), а функция $q^{\text{inv}}(t)$ – решением обратной задачи в полной постановке (1), (7) градиентным методом минимизации целевого функционала (8). Смысл каждого из графиков – величина расхождения между начальным приближением, выбранным исходя из методов асимптотического анализа, и решением обратной задачи в полной постановке, а именно, чем меньше величина соответствующей нормы разности, тем ближе начальное приближение лежит к истинному решению. Из полученных результатов, представленных на фигуре, можно сделать вывод, что при достаточно малых значениях ε (например, для $\varepsilon = 10^{-2.5}$) решение, найденное из редуцированной постановки задачи, достаточно близко к решению рассматриваемой обратной задачи в полной постановке (что, в частности, подтверждает основной результат работы [40]). Однако с увеличением ε метод, основанный на минимизации целевого функционала (8), позволяет существенным образом уточнить начальное приближение, которое является лишь грубым приближением истинного решения. Более того, с увеличением ε уменьшается зависимость этой разницы от погрешности δ_1 задания входных данных. В случае достаточно малого значения ε, когда в случае данных без ошибки алгоритм из [40] дает решение, мало отличающееся от точного, при наличии ошибок в экспериментальных данных градиентный метод реализует процедуру сглаживания.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены особенности численного восстановления граничного условия в обратной задаче для уравнения типа реакция-диффузия-адвекция с данными о положении фронта реакции. Для решения обратной задачи использовался метод, основанный на минимизации целевого функционала градиентным методом с выбором начального приближения, поиск которого основан на применении методов асимптотического анализа. Продемонстрировано, что при определенных условиях градиентный метод может существенным образом уточнить априорную информацию о решении, полученную методами асимптотического анализа. Однако по итогам проведенного исследования необходимо сделать следующие замечания.

1. При построении “хорошего” начального приближения $q^{(0)}(t)$ с помощью алгоритма, предложенного в работе [40], ошибка, определяющая разность между этим приближением и истинным решением, оценивалась лишь численно. Вопрос о возможности выполнения строгих аналитических оценок остается открытым и представляет существенный интерес как тема отдельной работы.

2. Вопрос о строгих условиях, при которых “хорошее” начальное приближение гарантированно лежит в окрестности глобального минимума целевого функционала, является открытым. Соответствующий вопрос также представляет существенный интерес и может являться темой отдельной работы, посвященной свойствам глобальной сходимости [49]–[51]. Отметим, что под глобально сходящимся алгоритмом подразумевается алгоритм, позволяющий найти глобальный минимум вне зависимости от выбора начального приближения. В том случае, если “хорошее” начальное приближение, выбираемое автоматически с помощью алгоритма из [40], лежит в окрестности глобального минимума, алгоритм будет обладать свойствами глобальной сходимости.

3. Для повышения эффективности численного счета при реализации градиентного метода минимизации целевого функционала, при решении прямой, сопряженной и вспомогательных стационарных задач можно использовать так называемые *динамически адаптированные сетки*. Техника построения таких сеток подробно описана в работе [35]. В связи с тем, что использование таких сеток не влияет на результаты этой работы, мы опустили описание их возможного применения.

4. В качестве перспектив развития предложенного метода следует отметить реализацию методов выполнения апостериорной оценки точности полученного решения [52]–[55].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Danilov V.G., Maslov V.P., Volosov K.A.* Mathematical modelling of heat and mass transfer processes. Kluwer, Dordrecht, 1995.
2. *Butuzov V.F., Vasil’eva A.B.* Singularly perturbed problems with boundary and interior layers: theory and applications // Advances in Chemical Physics. 1997. V. 97. P. 47–179.
3. *Liu Z., Liu Q., Lin H.-C., Schwartz C. S., Lee Y.-H., Wang T.* Three-dimensional variational assimilation of MODIS aerosol optical depth: implementation and application to a dust storm over East Asia // Journal of Geophysical Research: Atmospheres. 2010. V. 116. № D23.
4. *Egger H., Fellner K., Pietschmann J.-F., Tang B.Q.* Analysis and numerical solution of coupled volume-surface reaction-diffusion systems with application to cell biology // Applied Mathematics and Computation. 2018. V. 336. P. 351–367.

5. *Yaparova N.M.* Method for determining particle growth dynamics in a two-component alloy // Steel in Translation. 2020. V. 50. № 2. P. 95–99.
6. *Wu X., Ni M.* Existence and stability of periodic contrast structure in reaction-advection-diffusion equation with discontinuous reactive and convective terms // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2020. V. 91. P. 105457.
7. *Lin G., Zhang Y., Cheng X., Gulliksson M., Forssen P., Fornstedt T.* A regularizing Kohn–Vogelius formulation for the model-free adsorption isotherm estimation problem in chromatography // Applicable Analysis. 2018. V. 97. № 1. P. 13–40.
8. *Zhang Y., Lin G., Gulliksson M., Forssen P., Fornstedt T., Cheng X.* An adjoint method in inverse problems of chromatography // Inverse Problems in Science and Engineering. 2017. V. 25. № 8. P. 1112–1137.
9. *Volpert A.I., Volpert V.A., Volpert Vl.A.* Traveling wave solutions of parabolic systems. American Mathematical Society, 2000.
10. *Meinhardt H.* Models of biological pattern formation. London: Academic Press, 1982.
11. *FitzHugh R.* Impulses and physiological states in theoretical model of nerve membrane // Biophysical Journal. 1961. V. 1. № 1. P. 445–466.
12. *Murray J.D.* Mathematical biology. I. An introduction. Springer, New York, 2002.
13. *Egger H., Pietschmann J.-F., Schlottbom M.* Identification of nonlinear heat conduction laws // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2015. V. 23. № 5. P. 429–437.
14. *Gholami A., Mang A., Biros G.* An inverse problem formulation for parameter estimation of a reaction-diffusion model of low grade gliomas // Journal of Mathematical Biology. 2016. V. 72. № 1–2. P. 409–433.
15. *Aliev R.R., Panfilov A.V.* A simple two-variable model of cardiac excitation // Chaos, Solitons and Fractals. 1996. V. 7. № 3. P. 293–301.
16. *Generalov E.A., Levashova N.T., Sidorova A.E., Chumankov P.M., Yakovenko L.V.* An autowave model of the bifurcation behavior of transformed cells in response to polysaccharide // Biophysics. 2017. V. 62. № 5. P. 876–881.
17. *Mang A., Gholami A., Davatzikos C., Biros G.* PDE-constrained optimization in medical image analysis // Optimization and Engineering. 2018. V. 19. № 3. P. 765–812.
18. *Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A.* Recovering a Time-Dependent Diffusion Coefficient from Nonlocal Data // Numerical Analysis and Applications. 2018. V. 11. P. 38–44.
19. *Mamkin V., Kurbatova J., Avilov V., Mukhartova Yu., Krupenko A., Ivanov D., Levashova N., Olchev A.* Changes in net ecosystem exchange of CO2, latent and sensible heat fluxes in a recently clear-cut spruce forest in western Russia: results from an experimental and modeling analysis // Environmental Research Letters. 2016. V. 11. № 12. P. 125012.
20. *Levashova N.T., Muhartova J.V., Olchev A.V.* Two approaches to describe the turbulent exchange within the atmospheric surface layer // Mathematical Models and Computer Simulations. 2017. V. 9. № 6. P. 697–707.
21. *Levashova N., Sidorova A., Semina A., Ni M.* A spatio-temporal autowave model of shanghai territory development // Sustainability. 2019. V. 11. № 13. P. 3658.
22. *Zakharova S.A., Davydova M.A., Lukyanenko D.V.* A spatio-temporal autowave model of shanghai territory development // Inverse Problems in Science and Engineering. 2020. V. 29. № 3. P. 365–377.
23. *Isakov V.M., Kabanikhin S.I., Shananin A.A., Shishlenin M.A., Zhang S.* Algorithm for determining the volatility function in the Black-Scholes model // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2019. V. 59. № 10. P. 1753–1758.
24. *Kadalbajoo M.K., Gupta V.* A brief survey on numerical methods for solving singularly perturbed problems // Applied Mathematics and Computation. 2010. V. 217. № 18. P. 3641–3716.
25. *Cannon J.R., DuChateau P.* An Inverse problem for a nonlinear diffusion equation // SIAM Journal on Applied Mathematics. 1980. V. 39. № 2. P. 272–289.
26. *DuChateau P., Rundel W.* Unicity in an inverse problem for an unknown reaction term in a reaction-diffusion equation // Journal of differential equations. 1985. V. 59. P. 155–165.
27. *Pilant M.S., Rundell W.* An inverse problem for a nonlinear parabolic equation // Communications in Partial Differential Equations. 1986. V. 11. № 4. P. 445–457.
28. *Kabanikhin S.I.* Definitions and examples of inverse and ill-posed problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16. № 4. P. 317–357.
29. *Kabanikhin S.I.* Inverse and Ill-posed Problems Theory and Applications. De Gruyter, 2011.
30. *Jin B., Rundell W.* A tutorial on inverse problems for anomalous diffusion processes // Inverse Problems. 2015. V. 31. P. 035003.
31. *Belonosov A., Shishlenin M.* Regularization methods of the continuation problem for the parabolic equation // Lecture Notes in Computer Science. 2017. V. 10187. P. 220–226.
32. *Kaltenbacher B., Rundell W.* On the identification of a nonlinear term in a reaction-diffusion equation // Inverse Problems. 2019. V. 35. P. 115007.

33. *Belonosov A., Shishlenin M., Klyuchinskiy D.* A comparative analysis of numerical methods of solving the continuation problem for 1D parabolic equation with the data given on the part of the boundary // Advances in Computational Mathematics. 2019. V. 45. № 2. P. 735–755.

34. *Kaltenbacher B., Rundell W.* The inverse problem of reconstructing reaction-diffusion systems // Inverse Problems. 2020. V. 36. № 065011.

35. *Lukyanenko D.V., Shishlenin M.A., Volkov V.T.* Solving of the coefficient inverse problems for a nonlinear singularly perturbed reaction-diffusion-advection equation with the final time data // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2018. V. 54. P. 233–247.

36. *Lukyanenko D.V., Prigorniy I.V., Shishlenin M.A.* Some features of solving an inverse backward problem for a generalized Burgers' equation // Journal of Inverse and Ill-posed Problems. 2020. V. 28. № 5. P. 641–649.

37. *Lukyanenko D.V., Borzunov A.A., Shishlenin M.A.* Solving coefficient inverse problems for nonlinear singularly perturbed equations of the reaction-diffusion-advection type with data on the position of a reaction front // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2021. V. 99. P. 105824.

38. *Lukyanenko D., Yeleskina T., Prigorniy I., Isaev T., Borzunov A., Shishlenin M.* Inverse problem of recovering the initial condition for a nonlinear equation of the reaction-diffusion-advection type by data given on the position of a reaction front with a time delay // Mathematics. 2021. V. 9. № 4. P. 342.

39. *Lukyanenko D.V., Grigorev V.B., Volkov V.T., Shishlenin M.A.* Solving of the coefficient inverse problem for a nonlinear singularly perturbed two-dimensional reaction-diffusion equation with the location of moving front data // Computers and Mathematics with Applications. 2019. V. 77. № 5. P. 1245–1254.

40. *Lukyanenko D.V., Shishlenin M.A., Volkov V.T.* Asymptotic analysis of solving an inverse boundary value problem for a nonlinear singularly perturbed time-periodic reaction-diffusion-advection equation // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2019. V. 27. № 5. P. 745–758.

41. *Vasil'eva A.B., Butuzov V.F., Nefedov N.N.* Singularly perturbed problems with boundary and internal layers // Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. 2010. V. 268. P. 258–273.

42. *Tikhonov A.N., Goncharsky A.V., Stepanov V.V., Yagola A.G.* Numerical methods for the solution of ill-posed problems. Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 1995.

43. *Alifanov O.M., Artuhin E.A., Rumyantsev S.V.* Extreme methods for the solution of ill-posed problems. M.: Nauka, 1988.

44. *Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A.* Quasi-solution in inverse coefficient problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16. № 7. P. 705–713.

45. *Hairer E., Wanner G.* Solving ordinary differential equations II. stiff and differential-algebraic problems. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996.

46. *Rosenbrock H.H.* Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // The Computer Journal. 1963. V. 5. № 4. P. 329–330.

47. *Alshin A., Alshina E., Kalitkin N., Koryagina A.* Rosenbrock schemes with complex coefficients for stiff and differential algebraic systems // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2006. V. 46. P. 1320–1340.

48. *Wen X.* High order numerical methods to a type of delta function integrals // Journal of Computational Physics. 2007. V. 226. № 2. P. 1952–1967.

49. *Egger H., Engl H.W., Klibanov M.V.* Global uniqueness and Holder stability for recovering a nonlinear source term in a parabolic equation // Inverse Problems. 2005. V. 21. № 1. P. 271–290.

50. *Belina L., Klibanov M.V.* A globally convergent numerical method for a coefficient inverse problem // SIAM Journal on Scientific Computing. 2008. V. 31. № 1. P. 478–509.

51. *Klibanov M.V., Fiddy M.A., Beilina L., Pantong N., Schenk J.* Picosecond scale experimental verification of a globally convergent algorithm for a coefficient inverse problem // Inverse Problems. 2010. V. 26. № 4. P. 045003.

52. *Chaikovskii D., Zhang Y.* Convergence analysis for forward and inverse problems in singularly perturbed time-dependent reaction-advection-diffusion equations // arXiv. 2021. arXiv:2106.15249 [math.NA]

53. *Yagola A.G., Leonov A.S., Titatenko V.N.* Data errors and an error estimation for ill-posed problems // Inverse Problems in Engineering. 2002. V. 10. № 2. P. 117–129.

54. *Dorofeev K.Y., Titatenko V.N., Yagola A.G.* Algorithms for constructing a posteriori errors of solutions to ill-posed problems // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2003. V. 43. № 1. P. 10–23.

55. *Leonov A.S.* A posteriori accuracy estimations of solutions to ill-posed inverse problems and extra-optimal regularizing algorithms for their solution // Numerical Analysis and Applications. 2012. V. 5. № 1. P. 68–83.