УДК 519.852

О. В. Щирба, асистент
Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, м. Кам'янець-Подільський

МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ТА ЙОГО РЕАЛІЗАЦІЯ МЕТОДОМ ВНУТРІШНЬОЇ ТОЧКИ

Проблеми ідентифікації функціональних параметрів дифузійних процесів, які описують екозабруднення річки, зводяться до задач лінійного програмування великої розмірності, які вирішуються за допомогою чисельних методів внутрішньої точки з використанням умов оптимальності Каруша-Куна-Таккера.

Ключові слова: *метод внутрішньої точки, метод сіток.*

Вступ. Одним із важливих прикладів практичного застосування математичних моделей дифузійних процесів може служити задача прогнозування екологічного забруднення річки шкідливими викидами, що потрапляють в неї з навколишніх підприємств. За її допомогою служби екологічного захисту можуть виявляти джерела викидів, що перевищують допустимі граничні норми, та спрогнозувати оптимальні дії на покращення екологічної обстановки. Побудову робочої моделі відображено, наприклад в [1].

Розв'язання задачі зводиться до серії задач лінійного програмування великої розмірності, які пропонується вирішувати за допомогою чисельних методів внутрішньої точки з використанням умов оптимальності Каруша-Куна-Таккера.

Постановка задачі. Для побудови спрощеної моделі дифузії екозабруднення в руслі річки відстань вздовж русла будемо визначати змінною z (координатною віссю Oz). Розглянемо випадок, коли в кожному j-му пункті спостережень із координатою z_i, $i=1,2,...,n$, в дискретні моменти часу t_j, $j=1,2,...,m$, вимірюється значення $X\left(t_j, z_i\right)$ концентрації забруднення річкової води. Розповсюдження забруднення у річці, тобто зміна з часом t концентрації забруднення $x\left(t,z\right)$ у кожній точці z вздовж русла річки, залежить від швидкості течії $v\left(t,z\right)$ і від коефіцієнта турбулентної дифузії $a\left(t,z\right)$ у точках z у моменти часу t і наближено описується диференціальним рівнянням в частинних похідних

$$\frac{\partial x\left(t,z\right)}{\partial t}=a\left(t,z\right)\frac{\partial^2 x\left(t,z\right)}{\partial z^2}-v\left(t,z\right)\frac{\partial x\left(t,z\right)}{\partial z}+u_2\left(t,z\right), \qquad (1)$$

де $u_2(t,z)$ — інтенсивність джерел забруднення річки у момент часу t у точці із координатою z. Розглянемо задачу відшукання викидів $u_2(t,z)$, які на основі даних вимірювань концентрацій забруднень $X(t_j,z_i)$ у пунктах спостережень z_i, $i=1,2,...n$, в дискретні моменти часу t_j, $j=1,2,...m$, мінімізують максимальне відхилення $J(u)$,

$$J(u)=\max_i \max_j \left|x(t_j,z_i)-X(t_j,z_i)\right| \tag{2}$$

за початкових та крайових умов

$$x(t_0,z)=\varphi(z),$$

$$x(t,0)=u_1(t),\ \frac{\partial x(t,l)}{\partial z}=0, \tag{3}$$

при обмеженнях

$$\left|du_1(t)/dt\right|\le C_{11},\left|u_1(t)-U_1(t)\right|\le C_{12}, \tag{4}$$

$$x(t,l)=x(t,l-\Delta z), \tag{5}$$

$$\left|\frac{\partial u_2(t,z)}{\partial t}\right|\le C_{21},\left|\frac{\partial u_2(t,z)}{\partial z}\right|\le C_{22},\left|u_2(t,z)-U_2(t,z)\right|\le C_{23}, \tag{6}$$

$$\left|\frac{\partial a(t,z)}{\partial t}\right|\le C_{31},\left|\frac{\partial a(t,z)}{\partial z}\right|\le C_{32},\left|a(t,z)-A(t,z)\right|\le C_{33}, \tag{7}$$

$$\left|\frac{\partial v(t,z)}{\partial t}\right|\le C_{41},\left|\frac{\partial v(t,z)}{\partial z}\right|\le C_{42},\left|v(t,z)-V(t,z)\right|\le C_{43} \tag{8}$$

із заданими осередненими значеннями $U_2(t,z), A(t,z), V(t,z)$ і заданими відхиленнями C.

Основний алгоритм. Оскільки точний розв'язок задачі (1)—(8) знайти неможливо, то скористаємось наближеним методом скінченних різниць (метод сіток). Для цього в області неперервної зміни аргументів (t,z) виділимо множину вузлів і замість функцій неперервного аргументу будемо розглядати їх апроксимації сітковими функціями. Відповідно всі похідні, що входять у диференціальне рівняння, заміняємо їх різницевими апроксимаціями для сіткових функцій і замість диференціального рівняння будемо розв'язувати відповідну різницеву систему алгебраїчних рівнянь. Початкові та крайові умови також замінюються різницевими початковими і крайовими умовами для сіткової функції.

Якщо скористатися різницевими апроксимаціями похідних на сітці

$$\omega_{\tau h} = \left\{ \left(t_j = ih, z_i = j\tau \right), j = \overline{0,m}, i = \overline{0,n} \right\} \tag{9}$$

з вибраними кроками

$$h = \frac{1}{n};\ \tau = \frac{T}{m}, \tag{10}$$

то всі рівняння та нерівності (1)—(8) апроксимуються у кожному вузлі сітки лінійними рівняннями та нерівностями від невідомих $x_{ji} = x\left(t_j, z_i\right), u_{ji} = u\left(t_j, z_i\right)$, а критерій оптимальності замінюється мінімізацією додаткової змінної p при додаткових нерівностях

$$\left| x\left(t_j, z_i\right) - X\left(t_j, z_i\right) \right| \le p$$

у вузлах пунктів спостережень та моментів часу вимірювання концентрацій $X\left(t_j, z_i\right)$.

Диференціальне рівняння (1) будемо апроксимувати різницевими рівняннями у вузлах сітки $\omega_{\tau h}$ (9)—(10), $i = \overline{0, n-1}, j = \overline{0,m}$ на шаблоні, визначеному чотирма точками $\left(t_{j+1}, u_i\right)$, $\left(t_j, u_i\right)$, $\left(t_j, u_{i+1}\right)$, $\left(t_j, u_{i-1}\right)$, виконавши відповідні заміни:

$$\frac{\partial x\left(t_j, z_i\right)}{\partial t} = \frac{x\left(t_{j+1}, z_i\right) - x\left(t_j, z_i\right)}{\tau};\ \frac{\partial x\left(t_j, z_i\right)}{\partial z} = \frac{x\left(t_j, z_{i+1}\right) - x\left(t_j, z_i\right)}{h};$$

$$\frac{\partial^2 x\left(t_j, z_i\right)}{\partial t} = \frac{\dfrac{\partial x\left(t_j, z_{i+1}\right)}{\partial z} - \dfrac{\partial x\left(t_j, z_{i-1}\right)}{\partial z}}{h} =$$

$$= \frac{\dfrac{x\left(z_{i+1}\right) - x\left(z_i\right)}{h} - \dfrac{x\left(t_j, z_i\right) - x\left(t_j, z_{i-1}\right)}{h}}{h} =$$

$$= \frac{x\left(t_j, z_{i+1}\right) - 2x\left(t_j, z_i\right) + x\left(t_j, z_{i-1}\right)}{h^2};$$

рівняння (1)—(8) замінимо різницевими рівняннями:

$$\frac{\tau a\left(t_j,z_i\right)}{h^2}x\left(t_j,z_{i-1}\right)+\left(1-\frac{2\tau a\left(t_j,z_i\right)}{h^2}+\frac{\tau v\left(t_j,z_i\right)}{h}\right)x\left(t_j,z_i\right)+$$

$$+\left(\frac{\tau a\left(t_j,z_i\right)}{h^2}-\frac{\tau v\left(t_j,z_i\right)}{h}\right)x\left(t_j,z_{i+1}\right)-x\left(t_{j+1},z_i\right)=-\tau u_2\left(t_j,z_i\right);$$

$$x\left(t_0,z_j\right)=\varphi\left(z_j\right);$$

$$\min_u J\left(u\right)=\min_u \max_{x(t,z)\in D}\left|x\left(t_j,z_i\right)-X\left(t_j,z_i\right)\right|;$$

$$x\left(t_j,0\right)=u_1\left(t_j\right);$$

$$\left|\frac{u_1\left(t_{j+1}\right)-u_1\left(t_j\right)}{\tau}\right|\le C_{11};\left|u_1\left(t_j\right)-U_1\left(t_j\right)\right|\le C_{12};$$

$$x\left(t,z_n\right)=x\left(t,z_{n-1}\right);$$

$$\left|\frac{u_2\left(t_{j+1},z_i\right)-u_2\left(t_j,z_i\right)}{\tau}\right|\le C_{21};\left|\frac{u_2\left(t_j,z_{i+1}\right)-u_2\left(t_j,z_i\right)}{h}\right|\le C_{22};$$

$$\left|u_2\left(t_j,z_i\right)-U_2\left(t_j,z_i\right)\right|\le C_{23};$$

$$\left|\frac{a\left(t_{j+1},z_i\right)-a\left(t_j,z_i\right)}{\tau}\right|\le C_{31};\left|\frac{a\left(t_j,z_{i+1}\right)-a\left(t_j,z_i\right)}{h}\right|\le C_{32};$$

$$\left|a\left(t_j,z_i\right)-A\left(t_j,z_i\right)\right|\le C_{33};$$

$$\left|\frac{v\left(t_{j+1},z_i\right)-v\left(t_j,z_i\right)}{\tau}\right|\le C_{41};\left|\frac{v\left(t_j,z_{i+1}\right)-v\left(t_j,z_i\right)}{h}\right|\le C_{42};$$

$$\left|v\left(t_j,z_i\right)-V\left(t_j,z_i\right)\right|\le C_{43}.$$

Особливістю цієї задачі лінійного програмування є її велика розмірність і тому для її розв'язання потрібно використовувати чисельні алгоритми орієнтовані на задачі великої розмірності.

Найбільш широко застосовується на практиці і, отже, найбільш відомим методом розв'язання загальної задачі ЛП є симплекс-метод. Незважаючи на те, що цей метод є досить ефективним алгоритмом, він є алгоритмом з експоненціальною складністю, непридатним для задач великої розмірності через те, що обсяг обчислювальної роботи зростає надто швидко із зростанням числа невідомих (перевищуючи можливості наявних комп'ютерів). Тому він мало придатний при розв'язуванні сіткових задач лінійного програмування, оскільки вони характеризуються великою розмірністю. Для розв'язання поставленої багатовимірної задачі оптимального керування системами з частинними похідними скористаємося методами внутрішньої точки, які мають поліноміальну збіжність і відносно легко програмно реалізуються.

Для побудови алгоритму з використанням методу внутрішньої точки, задачу (1)—(8) приводимо до задачі лінійного програмування у стандартній формі:

$$\begin{gathered} \min C^T x, \\ Ax = b,\ x \geq 0, \end{gathered} \tag{11}$$

де $A \in R^{m \times n}, b \in R^m, c \in R^n, x \in R^n$ і $m \leq n$.

У побудованій системі різницевих рівнянь частина матриці A, яка відповідає за умови (1)—(3), буде квадратною матрицею, яка має $r \times s$ рядків і стовпців. Її зручно подати у вигляді блочної матриці, що складається з r рядків і стовпців, блоками якої будуть матриці розмірності $s \times s$.

$$A = \begin{pmatrix} E & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ A^{-1} & -E & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & A^2 & -E & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & A^{r-1} & -E \end{pmatrix},$$

де матриця A_j має вид

$$A^j = \begin{pmatrix} \beta_{j1} & \gamma_{j1} & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_{j2} & \beta_{j2} & \gamma_{j2} & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{j3} & \beta_{j2} & \gamma_{j2} & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \lambda_{js-2} & \beta_{js-2} & \gamma_{js-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & \lambda_{js-1} & \beta_{js-1} & \gamma_{js-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & \lambda_{js-1} & \beta_{js-1} & \gamma_{js-1} \end{pmatrix},$$

$$\lambda_{ji} = \frac{\tau a_{ji}}{h^2},\ \beta_{ji} = 1 - \frac{2\tau a_{ji}}{h^2} + \frac{\tau v_{ji}}{h},\ \gamma_{ji} = \left(\frac{\tau a_{ij}}{h^2} - \frac{\tau v_{ij}}{h} \right).$$

Вектор b має вигляд

$$b=\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \dots \\ d_{s-1} \\ d_{s-1} \\ d_{s+1} \\ -\tau u_{212} \\ -\tau u_{213} \\ \dots \\ -\tau u_{21s-1} \\ -\tau u_{21s-1} \\ d_{2s+1} \\ \dots \\ -\tau u_{2r-1s-1} \\ -\tau u_{2r-1s-1} \end{pmatrix},$$

де

$$d_i=\tau u_{20i}+\frac{\tau a_{0i}}{h^2}x_{0i-1}+\left(1-\frac{2\tau a_{0i}}{h^2}+\frac{\tau v_{0i}}{h}\right)x_{oi}+\left(\frac{\tau a_{0i}}{h^2}-\frac{\tau v_{0i}}{h}\right)x_{oi+1},$$

$$i=\overline{1,s-1}.$$

Загальний вигляд матриці A та вектора b буде ще складнішим. Їх необхідно доповнити перетворенням обмежень (6)—(8) у вигляді різницевих рівнянь.

Двоїста задача до задачі (11) матиме вигляд:
знайти

$$\max b^T y \tag{12}$$

при обмеженнях

$$A^T y+z=c,\ z\ge 0,$$

де $y\in R^m$ — вектори вільних змінних і $z\in R^n$ — вектор зведення обмежень нерівностей у обмеження рівняння.

Умови Каруша-Куна-Таккера для рівнянь (11) і (12) мають вигляд:

$$\begin{gathered} Ax-b=0; \\ A^T y+z-c=0; \\ ZXe=0; \\ (x,z)\ge 0, \end{gathered} \tag{13}$$

де $e = (1,1,...,1) \in R^n$, $X = \mathrm{diag}(x)$ і $Z = \mathrm{diag}(z)$ — діагональні матриці, складені з векторів *x* та *z* відповідно.

Система (13) визначає необхідні і достатні умови оптимальності розв'язку задач (11) і (12) (якщо ці розв'язки існують). Тобто, якщо оптимальний розв'язок задачі (11) існує, то він є розв'язком системи (13) і навпаки (аналогічно і для двоїстої задачі (12)). Тому для знаходження розв'язку задачі (11) достатньо знайти розв'язок системи (13).

Для розв'язання системи (13) використовуємо ітераційний метод лінеаризації. За стартову точку прямо-двоїстого ітераційного процесу виберемо довільну внутрішню допустиму точку (x_0, y_0, z_0) задачі (11)—(12). Вектор x_0 повинен задовольняти умовам $Ax_0 = b,\ x_0 > 0$. В свою чергу, двоїстий вектор z_0 також задовольняє певним обмеженням, а саме:

$$A^T y_0 + z_0 = c,\ z_0 > 0,$$

а вектор y_0 приймає вільні значення.

Тобто, початкове значення x_0, y_0 вибираємо так, щоб кожна координата цих векторів була більшою від нуля.

На *k*-ій ітерації знаходимо поправку $\delta x, \delta y, \delta z$ до наближеного значення (x_k, y_k, z_k), яка (після підстановки в систему (13)) повинна була б задовольняти нелінійну систему (14):

$$\begin{gathered} A\left(x^k + \delta x\right) - b = 0; \\ A^T\left(y^k + \delta y\right) + z^k + \delta z - c = 0; \\ \left(X^k + \delta X\right)\left(Z^k + \delta Z\right)e = 0; \\ x^k + \delta x \ge 0,\ z^k + \delta z \ge 0. \end{gathered} \tag{14}$$

Замість (14) будемо розв'язувати лінеаризовану систему

$$\begin{gathered} A\delta x = r_p; \\ A^T\delta_y + \delta z = r_d; \\ Z^k\delta x + X^k\delta z = r_a, \end{gathered} \tag{15}$$

де $r_p = b - Ax^k,\ r_d = c - z^k - A^T y^k,\ r_a = -X^k Z^k e.$

Підставивши отримане із другого рівняння системи (15) значення $\delta z = r_d - A^T\delta y$ у третє рівняння цієї системи, отримаємо наступну систему уже лише двох рівнянь

$$\begin{aligned} &A\delta x = r_p; \\ &Z^k \delta x - X^k A^T \delta y = r_a - X^k r_d. \end{aligned} \tag{16}$$

Помноживши друге рівняння системи (16) на обернену матрицю $\left(X^k\right)^{-1}$ (для спрощення замість X^k і Z^k будемо писати X і Z), одержимо:

$$\begin{aligned} &A\delta x = r_p; \\ &-X^{-1} Z \delta x + A^T \delta y = r_d - X^{-1} r_a. \end{aligned} \tag{17}$$

Помножимо друге рівняння системи (17) на обернену матрицю $C = \left(X^{-1}Z\right)^{-1}$ і отримане значення $\delta x = CA^T \delta y - C\left(r_d - X^{-1} r_a\right)$ підставимо у перше рівняння системи (17). В результаті одержимо остаточне рівняння, тобто система складатиметься лише з одного матричного рівняння:

$$ACA^T \delta y = r_p + C\left(r_d - X^{-1} r_a\right). \tag{18}$$

Система (18) є системою лінійних неоднорідних рівнянь, яку можна розв'язати будь-яким із класичних методів. Наприклад, систему можна розв'язати методом Гауса або, враховуючи симетричність коефіцієнту біля δy, скористатися схемою Халецького [3].

Далі, виконавши зворотні підстановки системи (17) та (15), за знайденим δy обчислюємо δx і δz:

$$\delta x = CA^T \delta y - C\left(r_d - X^{-1} r_a\right), \delta z = r_d - A^T \delta y.$$

Для одержання наступного значення $\left(x_{k+1}, y_{k+1}, z_{k+1}\right)$ вдруге розв'язуємо систему (14) (розв'язання цієї системи знову проводиться за допомогою перетворення системи (14) у системи (15), (16), (17) та (18) і зворотними підстановками одержаних значень) із заміною вектора r_a вектором $\mu^k e - \Delta a X^k \Delta a Z^k e - X^k Z^k e.$

Для методу внутрішньої точки параметр μ^k потрібно вибирати із співвідношення:

$$\mu^k = \sigma^k \left(\frac{\gamma^k}{n}\right),$$

де $\gamma^k = \left(x^k\right)^T z^k, \tilde{\gamma}^k = \left(x^k + \tilde{a}^k \delta x^k\right)^T \left(z^k + \tilde{a}^k \delta z^k\right), \sigma^k = \left(\frac{\tilde{\gamma}^k}{\gamma^k}\right)^2.$

При цьому в даному чисельному методі правила вибору параметра $\tilde{a}^k$ визначаються необхідністю збереження для послідовності точок (x_k, y_k, z_k) умови внутрішності. Отже, якщо опустити індекс *k*, то

$$\mu = \sigma\left(\frac{\gamma}{n}\right) = \left(\frac{\tilde{\gamma}}{\gamma}\right)\left(\frac{\gamma}{n}\right) = \frac{(\tilde{\gamma})^2}{\gamma n} = \frac{\left((x + \tilde{a}\delta x)^T (z + \tilde{a}\delta z)\right)^2}{(x)^T zn},$$

де $\tilde{\alpha}$ — це максимальне число, при якому виконуються нерівності

$$x + \tilde{a}\delta x \geq 0,\ z + \tilde{a}\delta z \geq 0,$$

тобто

$$a_1 = \min_i \left(\frac{-x_i}{\delta x_i}\right) \Big| \delta x_i < 0,\ a_2 = \min_i \left(\frac{-z_i}{\delta z_i}\right) \Big| \delta z_i < 0, \qquad (19)$$

$$\tilde{a} = \min\{a_1, a_2\}.$$

Зауважимо, що мінімум у співвідношеннях (19) не досягається із збереженням умови внутрішності, тобто принаймні одна із координат x_i чи z_i перетворюється в нуль. В чисельних розрахунках для індексу *i*, на якому досягається мінімум доводиться брати наближення з деякою точністю. В [2] та [6] замовчується про методу вибору параметрів μ^k та α^k, а в [5] наводиться порівняння чисельних експериментів при різних варіантах фіксованих числових значень цих параметрів.

Для центрування одержаного значення $(x_{k+1}, y_{k+1}, z_{k+1})$ покладаємо

$$(x_{k+1}, y_{k+1}, z_{k+1}) = (x_k, y_k, z_k) + \alpha(\Delta x, \Delta y, \Delta z).$$

Різниця між $\tilde{\alpha}$ та $\alpha, \delta x$ та $\Delta x, \delta y$ та $\Delta y, \delta z$ та Δz полягає у тому, що перші параметри обчислюються при $r_a = -X^k Z^k e,$ а відповідні другі при $r_a = \mu^k e - \Delta\alpha X^k \Delta\alpha Z^k e - X^k Z^k e,$ тобто при першому чи другому розв'язуванні системи (14).

Комп'ютерна реалізація алгоритму. Запропонований вище алгоритм методу внутрішньої точки розв'язання задачі прогнозування розповсюдження екозабруднень в руслі річки був реалізований у вигляді комп'ютерної програми в середовищі Visual Basic для ПК. Експерименти проводилися при різних значеннях кількості невідомих і обмежень задачі (11). Кількість невідомих варіювалася від 30 до 3000, а кількість обмежень — від 20—120. Алгоритм показав хорошу стабільність в плані збіжності.

Висновки. На основі ідеї апроксимації диференціальних рівнянь різницевими рівняннями [4] задача прогнозування екологічного забруднення зводиться до задачі лінійного програмування великої розмірності. Запропонований чисельний метод внутрішньої точки дозволяє розв'язувати її із хорошою збіжністю алгоритму.

Список використаних джерел:

1. Бейко І. В. Побудова робочої моделі для прогнозування процесів перенесення екологічних забруднень у річкових басейнах / І. В. Бейко, Т. І. Коробко // Вісник КНУ. Кібернетика, № 3, — 2002, — С. 15—16
2. Евтушенко Ю. Г. Применение метода Ньютона к решению задач линейного программирования / Ю. Г. Евтушенко, В. Г. Жадан, А. П. Черенков // Журнал вычислительной математики и математической физики. — Том 35, 1995. — № 6. — С. 850—866.
3. Калиткин Н. Н. Численные методы / Н. Н. Калиткин. — М. : Наука, 1978. — 512 с.
4. Ортега Дж. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений / Дж. Ортега, У. Пул. — М. : Наука, 1986. — 288 с.
5. Boyd S. P. Convex Optimization / S. Boyd, L. Vandenberghe // Cambridge University Press. — 2004. — 716 p.
6. Evtushenko Yu. Computation of exact gradients in distributed dynamic systems / Yu. Evtushenko // Optimization methods and software. — 1998.— Vol. 9, № 1—3. — P. 45—75.

Problems of identification of functional parameters of diffusion processes, that describe river pollutions, are reduced to linear programming problems of large dimension, that are solved by implementation of numerical interior point methods with Karush-Kuhn-Tucker optimality conditions.

Key words: *interior-point method, method nets.*

Отримано: 19.05.10