

DOI :10.3880/j.issn.1006-7647.2010.06.004

二维流 Boussinesq 方程渗透系数反演的变分伴随方法

王兵贤^{1,2}, 王泽文^{1,2}, 徐定华³, 胡康秀²

(1. 核资源与环境省部共建国家重点实验室培育基地(东华理工大学), 江西 南昌 330013;
2. 东华理工大学数学与信息科学学院, 江西 抚州 344000; 3. 浙江理工大学数学研究所, 浙江 杭州 310018)

摘要 :用偏微分方程最优控制中的变分伴随方法研究平面二维流 Boussinesq 方程渗透系数反演问题, 根据正则化方法改造最小二乘方法并构造目标泛函, 依据变分伴随方法构造迭代算法, 迭代过程中搜索方向选取泛函下降最快的负梯度方向。数值模拟结果表明该算法用于渗透系数的反演是可行的。

关键词 :Boussinesq 方程; 渗透系数; 变分伴随方法; 反问题

中图分类号 :O175.29 **文献标识码** :A **文章编号** :1006-7647(2010)06-0011-04

Variational adjoint method for inversion of permeability coefficient of two-dimensional flow Boussinesq equation//WANG Bing-xian^{1,2}, WANG Ze-wen^{1,2}, XU Ding-hua³, HU Kang-xiu² 1. State Key Laboratory Breeding Base of Nuclear Resources and Environment, East China Institute of Technology, Nanchang 330013, China; 2. School of Mathematics and Informational Sciences, East China Institute of Technology, Fuzhou 344000, China; 3. Institute of Mathematics, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou 310018, China)

Abstract :The inversion of permeability coefficient of two-dimensional flow Boussinesq equation was discussed by use of the variational adjoint method proposed in the optimization control for partial differential equations. The least squared method was modified by means of the idea of regularization, and a target arbitrary function was established. A new iteration algorithm was derived by using the variational adjoint method. The negative gradient direction was selected as the iteration direction. The results of numerical simulations indicate that the proposed algorithm is applicable to the inversion of the permeability coefficient.

Key words :Boussinesq equation; permeability coefficient; variational adjoint method; inversion

随着社会生产技术的发展,出现了许多与地下水有关的新课题,如工业废水的排放导致地下水受到严重污染等,因此研究地下水水质模型、控制地下水污染等课题的研究变得刻不容缓。该类问题往往归结为微分方程反问题。金忠青等^[1]在其专著《工程水力学反问题》中综述了 10 几年来反问题研究在工程水力学方面的突出成果,系统地描述了这方面的理论方法及实际应用背景。周孝德^[2-3]在反问题的稳定性方面也进行了专门的研究,得出了一些有益的结果。

合理确定地下水渗流模型参数是地下水模拟分析中的重要课题之一,在工程水力学领域,人们对参数反演问题做了大量的研究工作并提出了计算方法^[4-6],大致分为 2 类:直接解法和间接解法。直接解法就是从联系水头(或浓度、温度等)和水文地质参数的偏微分方程或它的离散形式出发,把方程中

的水头(或浓度、温度等)代之以实际观测值,直接把未知的水文地质参数解出来。局部直接求逆法、数学规划法、罚函数直接法等都属于直接解法。间接解法充分利用求解正问题是适定的这一性质,把反问题化为一系列的正问题。虽然间接解法所需机时比较多,但是比较稳定、实用,所以,目前一般都采用间接解法。具体操作时,往往先给待定的水文地质参数假设 1 组初值,然后利用这组参数和相应的水流模型去求解正问题,计算出各点在某时刻的水头值,根据计算值和实际观测值之间的误差,不断修改水文地质参数。如此反复修改,直到计算值和观测值相差很小时为止,这时的水文参数值就是所求的水文地质参数值^[7]。遗传算法、同伦法、非线性最优化方法等都属于间接解法。

20 世纪 80 年代初期由 leDimet 等^[8]对气象资料变分同化过程提出了伴随方法,自此,变分伴随方法

在气象学与海洋学领域中的应用研究在国际上引起了广泛关注,其中,对初边值条件、模式参数反演的研究占很大一部分^[9-11]。杜华栋等^[12]利用变分伴随方法对一维半地转浅水模式中各参量的反演进行了理论分析和数值试验。Peng 等^[13]利用该方法对初始条件进行反演以提高暴风雨预报的准确性。然而,变分伴随方法运用于反问题的研究大多表现在对低维线性模型进行简单的理论分析和数值模拟。本文用变分伴随方法求解平面矩形域上二维流 Boussinesq 方程的渗透系数,利用正则化思想构造泛函,采用变分伴随方法建立迭代格式,数值模拟结果表明了算法的有效性。

1 反问题的提出

考虑平面二维流的 Boussinesq 方程初边值问题^[14]:

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x,y)h(x,y,t) \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[k(x,y)h(x,y,t) \frac{\partial h}{\partial y} \right] + f(x,y,t) \\ h(0,y,t) = u_0(y,t) \\ h(l_1,y,t) = u_1(y,t) \\ h(x,0,t) = v_0(x,t) \\ h(x,l_2,t) = v_1(x,t) \\ h(x,y,0) = \varphi(x,y) \\ (x,y) \in \Omega, t > 0, 0 \leq y \leq l_2, 0 \leq x \leq l_1 \end{cases} \quad (1)$$

式中: t 为时间; Ω 为平面区域,这里为矩形区域 $[0,l_1] \times [0,l_2]$,其中 l_1,l_2 为区间端点; x 和 y 为平面区域上任一点的坐标; $k(x,y)$ 为渗透系数,表示岩层透水性大小,在均匀岩层中,渗透系数是与渗透区域坐标无关的常数,而在非均匀岩层中,渗透系数随空间坐标的变化而变化,这里 $k(x,y)$ 为各向同性时空位置的函数; $h(x,y,t)$ 为水头或潜水的的水位; u_0,u_1 分别为 $x=0,x=l_1$ 时 $h(x,y,t)$ 关于 y 的变化情况; v_0,v_1 分别为 $y=0,y=l_2$ 时 $h(x,y,t)$ 关于 x 的变化情况; $\varphi(x,y)$ 为水头初值; $f(x,y,t)$ 为入渗强度。

若 $k,f,u_0,u_1,v_0,v_1,\varphi$ 已知且满足适当的光滑性条件时,由偏微分方程理论可知式(1)的解 $h(x,y,t)$ 存在且唯一。此时称该初边值问题为正问题。

若给定 $h(x,y,t)$ 在某时刻 $T(T>0)$ 的近似值(测量值) $\varphi(x,y)$,来确定渗透系数 $k(x,y)$,则该问题为系数反问题。这类系数反演问题是偏微分方程反问题的重要问题,也是工程技术领域中的重要课题。

2 反问题的求解过程

2.1 目标泛函的构造

用正则化方法,改造最小二乘方法构造如下泛函表达式:

$$J(k) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} [h(x,y,T) - \varphi(x,y)]^2 dx dy + \frac{\gamma^2}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 \right] dx dy dt \quad (2)$$

式中: $\frac{\gamma^2}{2} \int_0^T \int_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 \right] dx dy dt$ 为引进的稳定化泛函; γ 为正则化参数。

基于最优化理论思想,将上述反问题转化为一个极小化问题:寻求最优的渗透系数 $k(x,y)$,使得目标泛函(式(2))达到极小,可以通过计算式(2)关于 $\hat{k}$ 方向的梯度,借助适当的下降算法使它达到极小。

2.2 目标泛函梯度的计算

目标泛函 $J(k)$ 关于 $\hat{k}$ 方向的梯度计算主要分为以下3个步骤:

第1步 推导切线性模式。

给 k 加一扰动 $\hat{k}$,记 $\tilde{k}(x,y) = k(x,y) + \alpha \hat{k}(x,y)$,其中 α 为系数,令 $\tilde{h}(x,y,t)$ 为扰动后式(1)的解,定义 $\hat{h}$ 为 h 在 $\hat{k}$ 方向的 Gâteaux 导数,即 $\hat{h} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\tilde{h} - h}{\alpha}$,则可以推导出 $\hat{h}(x,y,t)$ 满足式(3),称式(3)为式(1)的切线性模式。

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k(x,y) \frac{\partial \hat{h}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[k(x,y) \frac{\partial \hat{h}}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\hat{k}(x,y)h(x,y,t) \frac{\partial h}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\hat{k}(x,y)h(x,y,t) \frac{\partial h}{\partial y} \right] \\ \hat{h}(0,y,t) = 0 \\ \hat{h}(l_1,y,t) = 0 \\ \hat{h}(x,0,t) = 0 \\ \hat{h}(x,l_2,t) = 0 \\ \hat{h}(x,y,0) = \varphi(x,y) \\ (x,y) \in \Omega, t > 0, 0 \leq y \leq l_2, 0 \leq x \leq l_1 \end{cases} \quad (3)$$

第2步 计算 $J(k)$ 在 $\hat{k}$ 方向的导数。

$$J'(k;\hat{k}) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{J(k + \alpha \hat{k}) - J(k)}{\alpha}$$

一方面,导数可写为 $J'(k;\hat{k}) = (\nabla_k J, \hat{k})$;另一方面,直接计算并化简可得

$$J'(k;\hat{k}) = \int_{\Omega} \left\{ h \right|_{t=T} [h(x,y,T) - \varphi(x,y)] \right\} dx dy -$$

$$\gamma^2 \int_0^T \int_{\Omega} \hat{h} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) dx dy dt$$

于是

$$(\nabla_k J, \hat{h}) = \int_{\Omega} \left\{ h \Big|_{t=T} [h(x, y, T) - \varphi(x, y)] \right\} dx dy - \gamma^2 \int_0^T \int_{\Omega} \hat{h} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) dx dy dt \quad (4)$$

第3步 引入伴随函数 $p(x, y, t)$ 构造伴随系统。

将式(3)乘以 $p(x, y, t)$, 并积分得

$$\int_0^T \int_{\Omega} \frac{\partial \hat{h}}{\partial t} p dx dy dt = \int_0^T \int_{\Omega} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} [k(x, y) \frac{\partial h}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial y} [k(x, y) \frac{\partial h}{\partial y}] - \frac{\partial}{\partial x} [k(x, y) h(x, y, t) \frac{\partial h}{\partial x}] - \frac{\partial}{\partial y} [k(x, y) h(x, y, t) \frac{\partial h}{\partial y}] \right\} p dx dy dt \quad (5)$$

化简式(5), 并结合式(3)中的边界条件, 构造相应的伴随系统:

$$\begin{cases} -\frac{\partial p}{\partial t} = h \left\{ \frac{\partial}{\partial x} [k(x, y) \frac{\partial p}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial y} [k(x, y) \frac{\partial p}{\partial y}] \right\} - \gamma^2 \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) \\ p(0, y, t) = 0 \\ p(l_1, y, t) = 0 \\ p(x, 0, t) = 0 \\ p(x, l_2, t) = 0 \\ p(x, y, T) = h(x, y, T) - \varphi(x, y) \\ (x, y) \in \Omega, t \geq 0, y \in [0, l_2], x \in [0, l_1] \end{cases} \quad (6)$$

将式(5)(6)代入式(4)得

$$\nabla_k J = \int_0^T \left(h \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial x} + h \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial p}{\partial y} \right) dt$$

2.3 建立迭代格式

设 $k_0(x, y)$ 为初始猜测函数, 可构造如下迭代格式:

$$k_{n+1} = k_n + D_n d_n \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

式中: d_n 为搜索步长, 采用非精确搜索中的标准 Wolfe 搜索^[15]; D_n 表示搜索方向, 选取 D_n 为目标泛函 $J(k)$ 的负梯度方向, 使目标泛函达到最小。

2.4 反问题的迭代算法

第1步 将式(1)中的渗透系数猜测函数设置为 $k_n (n = 0, 1, 2, \dots)$, 求解一系列正问题(式(1)), 得到解析解或者数值解 $h(x, y, t)$ 。

第2步 将测量值 $\varphi(x, y)$ 和式(1)的解 $h(x, y, t)$ 代入伴随系统(式(6)), 其解为 $p(x, y, t)$, 从而得到 $\nabla_k J$ 在 k_n 处的值。

第3步 给定一个很小的正数 ϵ 、渗透系数初始猜测函数 k_0 , 通过迭代格式(式(7))得到近似解

序列 $k_n (n = 0, 1, 2, \dots)$ 。

第4步 判断 $J(k_{n+1}) < J(k_n)$ 是否成立:

①是, 则进一步判断 $J(k_n) < \epsilon$ 是否成立: 是, 则得到 $k_{n+1} \approx k$; 否, 则回到第1步。②否, 则重新选取 d_n , 然后回到第3步。

第5步 输出 k 的近似结果。

3 数值模拟

为检验上面的理论结果, 根据算法中给出的步骤进行数值模拟试验。首先, 将区间 $[0, l_1] \times [0, l_2]$ 及 $[0, T]$ 分别进行 m_x, m_y 和 n 等分, 利用欧拉向前有限差分方法求解式(1); 其次, 取上面相同的网格剖分求解伴随系统(式(6)); 然后, 求解相应迭代格式(式(7)), 从而得到 k 的近似结果; 最后, 定义整体误差泛函, 进行误差估计:

$$\epsilon(k^*, k') = \frac{1}{m_x m_y} \sum_{i=1}^{m_x-1} \sum_{j=1}^{m_y-1} |k^*(x_i, y_j) - k'(x_i, y_j)| \quad (8)$$

式中: $k^*(x, y)$ 为精确解; $k'(x, y)$ 为终止迭代时的近似解; $\epsilon(k^*, k')$ 为精确解和近似解的整体误差。

试验1: 取 $l_1 = l_2 = \pi$, $\varphi(x, y) = (x + y) \cdot e^{-(x+y)}$, $u_0(t) = (t + y) e^{-t-y}$, $u_1(t) = (t + \pi + y) \cdot e^{-t-\pi-y}$, $v_0(t) = (t + x) e^{-t-x}$, $v_1(t) = (t + x + \pi) \cdot e^{-t-x-\pi}$ 。若 $h(x, y, t)$ 的真值为 $h(x, y, t) = (t + x + y) e^{-t-x-y}$, 则 $f(x, y, t)$ 可由方程计算得到。给定 $h(x, y, T)$ 的测量值 $\varphi(x, y)$, 反演 $k(x, y)$ 。

由于在水动力学研究中, 渗透系数往往被取为常数, 当渗流介质是具有大裂隙的砂岩时, 根据经验值其渗透系数大约为 $0.5 \times 10^{-2} \sim 1.3 \times 10^{-2} \text{ cm/s}$ 。因此, 选取 $1.0 \times 10^{-2} \text{ cm/s}$ 作为渗透系数的精确值, 取 $T = 1$, 空间网格剖分中 $m_x = 10, m_y = 10$, 时间网格剖分中 $n = 200$, 目标泛函 J 的精度要求取为 10^{-8} , 选取 k 的初始猜测函数为 $k_0(x, y) = 1.1 \times 10^{-2} \text{ cm/s}$, 将其代入方程并通过有限差分方法求解式(1), 得到在 $T = 1$ 时刻的值, 将其作为测量值, 从而计算 k 的近似结果, 模拟结果见图1, 目标泛函在迭代过程中的变化情况见图2, 并根据式(8)计算出

—精确解 * 反演解

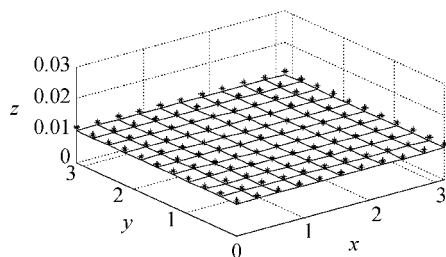


图1 试验1中 $k(x, y)$ 精确解和反演解的比较

整体误差为 6.5800×10^{-4} 。

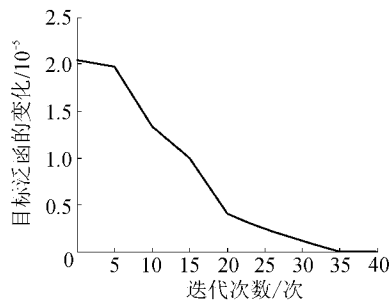


图 2 试验 1 中目标泛函 J 在迭代过程中的变化

试验 2 选取函数 $k^*(x,y)=\sin(x+y)$ 作为渗透系数的精确值,取 $T=1$,空间网格剖分中 $m_x=10$, $m_y=10$,时间网格剖分中 $n=200$,目标泛函 J 的精度要求取为 10^{-8} ,选取 $k(x,y)$ 的初始猜测函数为 $k_0(x,y)=\sin(x+y)+\frac{1}{L}x+\frac{1}{L}y+0.001$ ($L=1000$) 将其代入方程并通过有限差分方法求解式 (1) 得到在 $T=1$ 时刻的值,将其作为测量值,从而计算 k 的近似结果,模拟结果见图 3,目标泛函在迭代过程中的变化情况见图 4,并根据式 (8) 计算出整体误差为 1.1181×10^{-3} 。

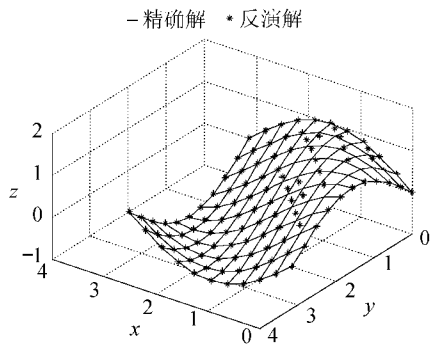


图 3 试验 2 中 $k(x,y)$ 精确解和反演解的比较

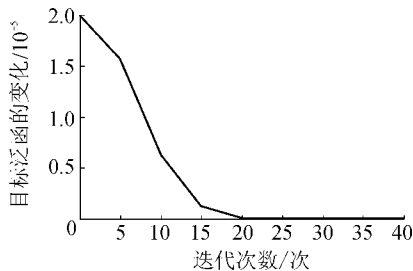


图 4 试验 2 中目标泛函 J 在迭代过程中的变化

以上数值模拟结果表明,用变分伴随方法反演二维流 Boussinesq 方程的渗透系数是可行的,但是本文算法局部收敛,对于初始猜测函数以及目标泛函中正则化参数的选取非常关键,而且本文所讨论算法的收敛性条件与算法分析证明还需要进一步研究,另外,该算法对于椭圆型方程反问题也有效。

参考文献：

[1] 金忠青,周志芳.工程水力学反问题[M].南京:河海大学出版社,1997.

[2] 周孝德.河流悬浮物扩散逆过程定解问题的稳定性分析[J].水利学报,1989(8):64-68.

[3] 周孝德.一维非恒定扩散逆过程定解问题稳定性分析[J].水利学报,1999(10):38-41.

[4] NEUMAN S P. Calibration of distributed parameter groundwater flow models viewed as a multiple-objective decision process under uncertainty[J]. Water Resource Research,1973,9(4):1006-1021.

[5] YEH W W G. Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: the inverse problem[J]. Water Resource Research,1986,22(2):95-108.

[6] 闵涛,张世梅,彭亚绵.二维恒定各向同性介质渗透系数反演的遗传算法[J].数学的实践与认识,2006,36(9):143-147.

[7] 薛禹群,谢春红.地下水数值模拟[M].北京:科学出版社,2007.

[8] leDIMET F,TALARAND O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorology observations, theoretical aspect[J]. Tellus,1986,38(A):97-110.

[9] NAVON I M,ZOU X L,DERBER J,et al. Variational data assimilation with an adiabatic version of the NMC spectral mode[J]. Mon Wea Rev,1992,120:1433-1446.

[10] HIROSHI K,MICHIO J K. A data assimilation technique applied to estimate parameters for the MEMURO marine ecosystem mode[J]. Ecological Modeling,2004,172(1):69-85.

[11] HUANG Si-xun, HAN Wei. Some issue about parameter inversion in atmospheric and oceanic sciences [C]// Proceeding of CAS-TWAS-WTO Form Second International Symposium on Physic-Mathematical Problems Related to Climate Modeling and Prediction. Shanghai: Chinese Academy of Sciences,2002:106-115.

[12] 杜华栋,黄思训,石汉青.一维半地转浅水模式反演的理论分析和数值试验[J].水动力学研究与进展:A辑,2004,19(1):38-45.

[13] PENG S Q,XIE L. Effect of determining initial conditions by four-dimensional variational data assimilation on storm surge forecasting[J]. Ocean Modeling,2006,14:1-18.

[14] 郭东屏,张石峰.渗流理论基础[M].西安:陕西科学技术出版社,1994.

[15] 赖炎连,贺国平.最优化方法[M].北京:清华大学出版社,2008.

(收稿日期 2010-01-27 编辑 骆超)